

PAT-NO:

JP02000355687A

DOCUMENT-IDENTIFIER: JP 2000355687 A

TITLE: NOVEL AZOLE DERIVATIVE, LUMINESCENT ELEMENT
MATERIAL, AND LUMINESCENT ELEMENT PREPARED THEREFROM

PUBN-DATE: December 26, 2000

INVENTOR-INFORMATION:

NAME

COUNTRY

YANAGI, TERUKAZU

N/A

IGARASHI, TATSUYA

N/A

ASSIGNEE-INFORMATION:

NAME

COUNTRY

FUJI PHOTO FILM CO LTD

N/A

APPL-NO: JP2000038578

APPL-DATE: February 16, 2000

PRIORITY-DATA: 11108208 (April 15, 1999)

INT-CL (IPC): C09K011/06, H05B033/14 , H05B033/22 , C07D213/42 ,
C07D215/18 , C07D231/12 , C07D235/18 , C07D241/12 , C07D249/08 ,
C07D263/56 , C07D271/06 , C07D271/10 , C07D277/66 , C07D285/125
, C07D487/04 , C07F003/06

ABSTRACT:

PROBLEM TO BE SOLVED: To obtain a material which gives a luminescent element having good luminescent characteristics by using a compound having a specific partial structure or a tautomer thereof or a metal complex having the compound or tautomer as a ligand.

SOLUTION: A compound having a partial structure represented by formula I or

a tautomer thereof or a metal complex having the compound or tautomer as a ligand is used. In formula I, Q1 is a group of atoms necessary for forming a nitrogen-containing aromatic 6-membered ring or a ring represented by formula II or III; X1 to X4 are each oxygen, sulfur, optionally substituted nitrogen, optionally substituted carbon, or selenium provided at least either X3 or X4 is oxygen, sulfur, optionally substituted nitrogen, or selenium; Q2 is a group of atoms necessary for forming an aromatic ring provided Q1 is not bonded to Q2 to form an aromatic fused ring structure; and Z is SO₂R₁, COR₂, or POR₃(R₄) (wherein R₁ to R₄ are each an aliphatic hydrocarbon group, aryl, heterocyclic, amino, alkoxy, aryloxy or heterocyclic oxy).

COPYRIGHT: (C) 2000, JPO

* NOTICES *

JPO and NCIPI are not responsible for any damages caused by the use of this translation.

1. This document has been translated by computer. So the translation may not reflect the original precisely.
2. **** shows the word which can not be translated.
3. In the drawings, any words are not translated.

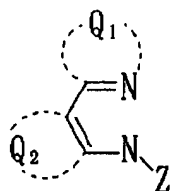
CLAIMS

[Claim(s)]

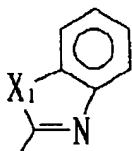
[Claim 1] The light emitting device ingredient characterized by being the compound which has the substructure expressed with the following general formula (I), or its tautomer.

[Formula 1]

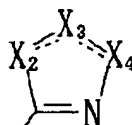
一般式 (I)



一般式 (II)



一般式 (III)



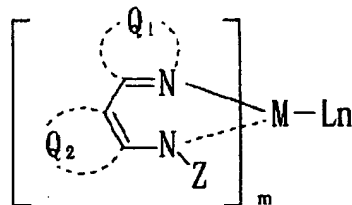
(Q1 expresses among a formula an atomic group required to form the ring expressed with nitrogen-containing aromatic series 6 membered-ring, a general formula (II), or a general formula (III).) X1 X2, X3, and X4 The carbon atom which is not permuted [the nitrogen atom which is not permuted / an oxygen atom, a sulfur atom a permutation, or /, a permutation, or] and a selenium atom are expressed. X3 X4 At least one side is the nitrogen atom which is not permuted [an oxygen atom, a sulfur atom, a permutation, or] and a selenium atom. Q2 An atomic group required to form an aromatic series ring is expressed. Q1 Q2 Aromatic series condensed ring structure is not taken unitedly. Z is SO two R1 and COR2. Or POR3 (R(R4) 1, R2, R3, and R4 express an aliphatic hydrocarbon radical, an aryl group, a heterocycle radical, the amino group, an alkoxy group, an aryloxy group, or a heterocycle oxy-radical, respectively.) is expressed.

[Claim 2] The light emitting device ingredient according to claim 1 characterized by being the metal complex which has in a ligand the compound which has the substructure expressed with a general formula (I), or its tautomer.

[Claim 3] The light emitting device ingredient according to claim 2 characterized by expressing a metal complex with the following general formula (K-I).

[Formula 2]

一般式 (K-I)



(Q1, Q2, and Z are synonymous with them of a general formula (I) among a formula.) M expresses a metal ion. m expresses the integer of 1-3. L expresses a ligand. n -- m+n= -- the integer used as 2 or 3 is expressed.

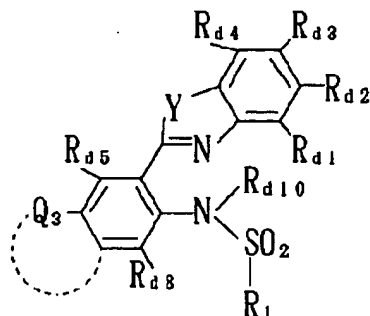
[Claim 4] The light emitting device ingredient according to claim 3 characterized by M being a divalent

or trivalent metal ion.

[Claim 5] The compound which has the substructure expressed with the following general formula (IV), or its tautomer.

[Formula 3]

一般式 (IV)



(R1 expresses an aliphatic hydrocarbon radical, an aryl group, a heterocycle radical, the amino group, an alkoxy group, an aryloxy group, or a heterocycle oxy-radical among a formula.) Rd1, Rd2, Rd3, Rd4, Rd5, Rd8, and Rd10 A hydrogen atom or a substituent is expressed, respectively. Y is an oxygen atom, a sulfur atom, N-R (R expresses a substituent.), and CH2. Or the permuted carbon atom or a selenium atom is expressed. Q3 An atomic group required to form a ring is expressed.

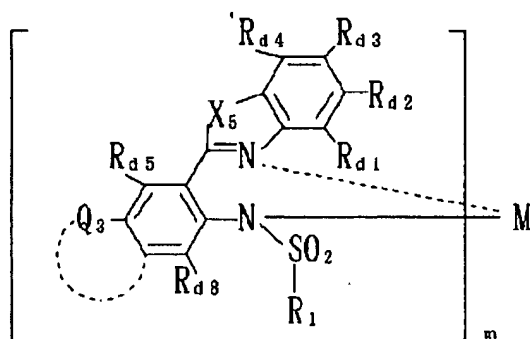
[Claim 6] The metal complex which has in a ligand the compound which has the substructure expressed with said general formula (IV), or its tautomer.

[Claim 7] The light emitting device ingredient characterized by being the metal complex which has in a ligand the compound which has the substructure expressed with said general formula (IV), or its tautomer.

[Claim 8] The metal complex expressed with the following general formula (K-IV).

[Formula 4]

一般式 (K-IV)



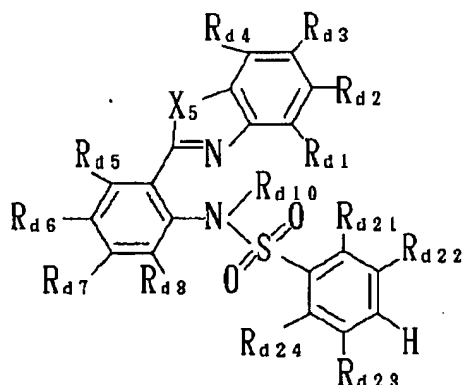
(R1 expresses an aliphatic hydrocarbon radical, an aryl group, a heterocycle radical, the amino group, an alkoxy group, an aryloxy group, or a heterocycle oxy-radical among a formula.) Rd1, Rd2, Rd3, Rd4, Rd5, and Rd8 express a hydrogen atom or a substituent, respectively. X5 The nitrogen atom which is not permuted [a ***** atom, a sulfur atom, a permutation, or] and CH2 Or the permuted carbon atom or a selenium atom is expressed. Q3 An atomic group required to form a ring is expressed. M expresses a metal ion. m expresses the integer of 1-3.

[Claim 9] The light emitting device ingredient characterized by being the metal complex expressed with a general formula (K-IV).

[Claim 10] The compound which has the substructure expressed with the following general formula (V), or its tautomer.

[Formula 5]

一般式 (V)



(Rd1, Rd2, Rd3, Rd4, Rd5, Rd6, Rd7, Rd8, Rd10, and Rd21, Rd22, Rd23 and Rd24 express a hydrogen atom or a substituent among a formula, respectively.) X5 The nitrogen atom which is not permuted [a ***** atom, a sulfur atom, a permutation, or] and CH2 Or the permuted carbon atom or a selenium atom is expressed.

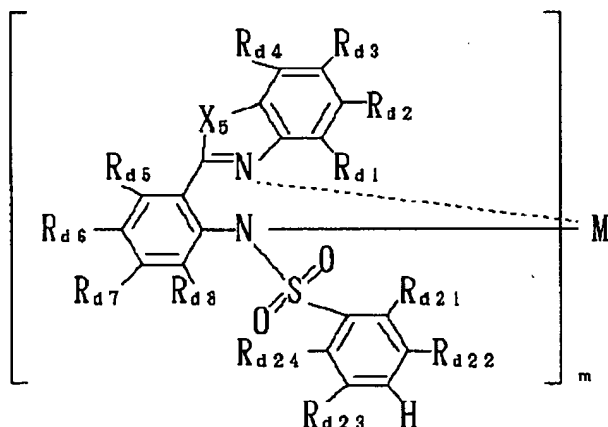
[Claim 11] The metal complex which has in a ligand the compound which has the substructure expressed with a general formula (V), or its tautomer.

[Claim 12] The light emitting device ingredient characterized by being the metal complex which has in a ligand the compound which has the substructure expressed with a general formula (V), or its tautomer.

[Claim 13] The metal complex expressed with the following general formula (K-V).

[Formula 6]

一般式 (K-V)



(Rd1, Rd2, Rd3, Rd4, Rd5, Rd6, Rd7, Rd8, Rd21, Rd22 and Rd23, and Rd24 express a hydrogen atom or a substituent among a formula, respectively.) X5 The nitrogen atom which is not permuted [a ***** atom, a sulfur atom, a permutation, or] and CH2 Or the permuted carbon atom or a selenium atom is expressed. M expresses a metal ion. m expresses the integer of 1-3.

[Claim 14] The light emitting device ingredient characterized by being the metal complex expressed with a general formula (K-V).

[Claim 15] The light emitting device characterized by being the layer in which at least one layer contains a compound or a light emitting device ingredient given [any / one] in claim 1-14 in the light emitting device in which two or more organic compound thin layers which contain a luminous layer or a luminous layer in inter-electrode [of a pair] were formed.

[Claim 16] The light emitting device characterized by being the layer to which at least one layer distributed the compound or light emitting device ingredient of any one publication of claim 1-14 to the polymer in the light emitting device in which two or more organic compound thin layers which contain a luminous layer or a luminous layer in inter-electrode [of a pair] were formed.

[Claim 17] The light emitting device characterized by being the layer in which the above-mentioned luminous layer contains a compound or a light emitting device ingredient given [any / one] in claim 1-14 in the light emitting device in which two or more organic compound thin layers which contain a luminous layer or a luminous layer in inter-electrode [of a pair] were formed.

[Claim 18] The light emitting device characterized by being the layer in which at least one layer between a luminous layer and cathode contains a compound or a light emitting device ingredient given [any / one] in claim 1-14 in the light emitting device in which two or more organic compound thin layers which contain a luminous layer or a luminous layer in inter-electrode [of a pair] were formed.

[Translation done.]

(19) 日本国特許庁 (J P)

(12) 公開特許公報 (A)

(11) 特許出願公開番号

特開2000-355687

(P2000-355687A)

(43) 公開日 平成12年12月26日 (2000. 12. 26)

(51) Int.Cl. ⁷	識別記号	F I	ページ・ト (参考)
C 0 9 K 11/06	6 6 0	C 0 9 K 11/06	6 6 0
H 0 5 B 33/14		H 0 5 B 33/14	B
33/22		33/22	B
// C 0 7 D 213/42		C 0 7 D 213/42	
215/18		215/18	

審査請求 未請求 請求項の数18 OL (全 31 頁) 最終頁に続く

(21) 出願番号 特願2000-38578(P2000-38578)

(22) 出願日 平成12年2月16日 (2000. 2. 16)

(31) 優先権主張番号 特願平11-108208

(32) 優先日 平成11年4月15日 (1999. 4. 15)

(33) 優先権主張国 日本 (J P)

(71) 出願人 000005201

富士写真フイルム株式会社

神奈川県南足柄市中沼210番地

(72) 発明者 柳 輝一

神奈川県南足柄市中沼210番地 富士写真
フイルム株式会社内

(72) 発明者 五十嵐 達也

神奈川県南足柄市中沼210番地 富士写真
フイルム株式会社内

(74) 代理人 100073874

弁理士 萩野 平 (外3名)

(54) 【発明の名称】 新規アゾール誘導体、発光素子材料およびそれを使用した発光素子

(57) 【要約】

【課題】 高輝度、高効率の発光が可能な発光素子材料及びそれを使用した発光素子を提供する。

する化合物からなる発光素子材料及びそれを使用した発光素子。

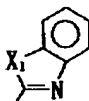
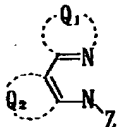
【化1】

【解決手段】 下記一般式 (I) で表される部分構造を有

一般式 (I)

一般式 (II)

一般式 (III)



式中、Q₁ は含窒素芳香族6員環、一般式 (II) 又は (I) で表される環を形成するに必要な原子群を表す。X₁ ~ X₄ はO、S、置換又は無置換の窒素原子、置換又は無置換の炭素原子、Seを表す。X₃、X₄ の少なくとも一方はO、S、置換又は無置換の窒素原子、Seである。Q₂ は芳香族環を形成するに必要な原子群を表

す。Q₁ と Q₂ が結合して芳香族縮環構造を取ることはない。Zは、SO₂ R₁、COR₂ 又はPOR₃ (R₄) (R₁、R₂、R₃ 及びR₄ は各々脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基又はヘテロ環オキシ基を表す。)を表す。

【特許請求の範囲】

*する発光素子材料。

【請求項1】 下記一般式(I)で表される部分構造を

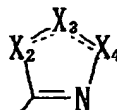
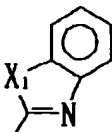
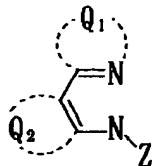
【化1】

有する化合物またはその互変異性体であることを特徴と*

一般式(I)

一般式(II)

一般式(III)



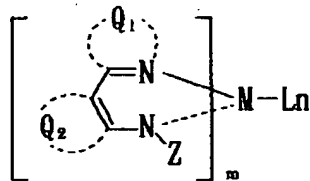
(式中、Q₁ は含窒素芳香族6員環、一般式(I I)または一般式(I I I)で表される環を形成するに必要な原子群を表す。X₁、X₂、X₃、X₄ は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、置換または無置換の炭素原子、セレン原子を表す。X₃、X₄ の少なくとも一方は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、セレン原子である。Q₂ は芳香族環を形成するに必要な原子群を表す。Q₁ とQ₂ が結合して芳香族縮環構造を取ることはない。Zは、SO₂ R₁、COR₂ またはPOR₃ (R₄) (R₁、R₂、R₃ およびR₄ はそれぞれ脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基またはヘテロ環オキシ基を表す。)を表す。)

【請求項2】 一般式(I)で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体であることを特徴とする請求項1に記載の発光素子材料。

【請求項3】 金属錯体が下記一般式(K-I)で表されることを特徴とする請求項2記載の発光素子材料。

【化2】

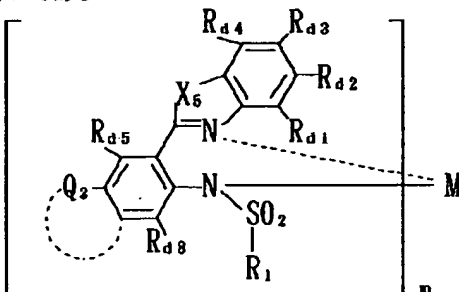
一般式(K-I)



(式中、Q₁、Q₂、及びZは一般式(I)のそれらと同義である。Mは金属イオンを表す。mは1~3の整数を表す。Lは配位子を表す。nはm+n=2または3となる整数を表す。)

【請求項4】 Mが2価または3価の金属イオンである※

一般式(K-IV)

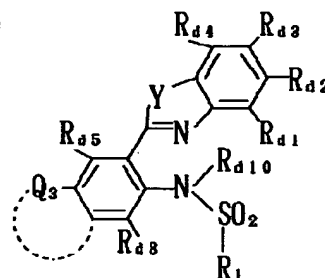


※ことを特徴とする請求項3に記載の発光素子材料。

【請求項5】 下記一般式(IV)で表される部分構造またはその互変異性体を有する化合物。

【化3】

一般式(IV)



(式中、R₁ は脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、またはヘテロ環オキシ基を表す。R_{d1}、R_{d2}、R_{d3}、R_{d4}、R_{d5}、R_{d6}、およびR_{d10} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。Yは酸素原子、硫黄原子、N-R (Rは置換基を表す。)、CH₂ もしくは置換された炭素原子、またはセレン原子を表す。Q₃ は環を形成するのに必要な原子群を表す。)

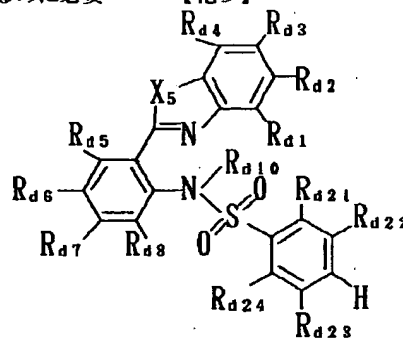
【請求項6】 前記一般式(IV)で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体。

【請求項7】 前記一般式(IV)で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体であることを特徴とする発光素子材料。

【請求項8】 下記一般式(K-IV)で表される金属錯体。

【化4】

(式中、 R_1 は脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、またはヘテロ環オキシ基を表す。 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、および R_{d8} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。 X_5 は酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子、 CH_2 もしくは置換された炭素原子、またはセレン原子を表す。 Q_3 は環を形成するのに必要*
一般式 (V)



(式中、 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、 R_{d6} 、 R_{d7} 、 R_{d8} 、 R_{d10} 、 R_{d21} 、 R_{d22} 、 R_{d23} 、 R_{d24} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。 X_5 は酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子、 CH_2 もしくは置換された炭素原子、またはセレン原子を表す。)
【請求項11】 一般式 (V) で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属*
一般式 (K-V)

*な原子群を表す。 M は金属イオンを表す。 m は1~3の整数を表す。)

【請求項9】 一般式 (K-I V) で表される金属錯体であることを特徴とする発光素子材料。

【請求項10】 下記一般式 (V) で表される部分構造またはその互変異性体を有する化合物。

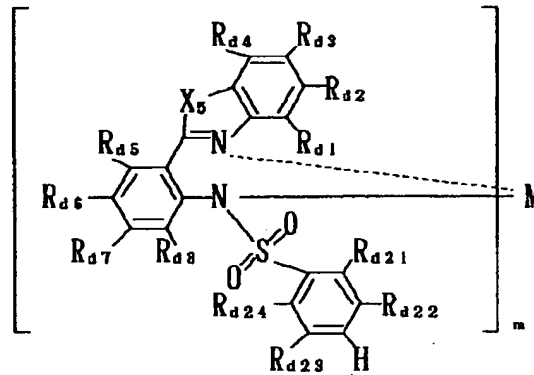
【化5】

※錯体。

20 【請求項12】 一般式 (V) で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体であることを特徴とする発光素子材料。

【請求項13】 下記一般式 (K-V) で表される金属錯体。

【化6】



(式中、 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、 R_{d6} 、 R_{d7} 、 R_{d8} 、 R_{d21} 、 R_{d22} 、 R_{d23} および R_{d24} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。 X_5 は酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子、 CH_2 もしくは置換された炭素原子、またはセレン原子を表す。 M は金属イオンを表す。 m は1~3の整数を表す。)
【請求項14】 一般式 (K-V) で表される金属錯体であることを特徴とする発光素子材料。
【請求項15】 一对の電極間に発光層もしくは発光層を含む複数の有機化合物薄層を形成した発光素子において、少なくとも一層が請求項1~14のいずれか1つに記載の化合物または発光素子材料を含有する層であるこ★50

★とを特徴とする発光素子。

40 【請求項16】 一对の電極間に発光層もしくは発光層を含む複数の有機化合物薄層を形成した発光素子において、少なくとも一層が請求項1~14のいずれか1つに記載の化合物または発光素子材料をポリマーに分散した層であることを特徴とする発光素子。

【請求項17】 一对の電極間に発光層もしくは発光層を含む複数の有機化合物薄層を形成した発光素子において、上記発光層が請求項1~14のいずれか1つに記載の化合物または発光素子材料を含有する層であることを特徴とする発光素子。

【請求項18】 一对の電極間に発光層もしくは発光層

を含む複数の有機化合物薄層を形成した発光素子において、発光層と陰極との間の少なくとも一層が請求項1～14のいずれか1つに記載の化合物または発光素子材料を含有する層であることを特徴とする発光素子。

【発明の詳細な説明】

【0001】

【発明の属する技術分野】本発明は、電気エネルギーを光に変換して発光できる化合物（発光素子用材料）および発光素子に関し、表示素子、ディスプレイ、バックライト、電子写真、照明光源、記録光源、読み取り光源、10 標識、看板、インテリア等の分野に好適に使用できる発光素子に関する。

【0002】

【従来の技術】今日、種々の表示素子に関する研究開発が活発であり、中でも有機電界発光（EL）素子は、低電圧で高輝度の発光を得ることができるため、有望な表示素子として注目されている。例えば、有機化合物の蒸着により有機薄膜を形成する発光素子が知られている（アプライド フィジックス レターズ、51巻、913頁、1987年）。この文献に記載された発光素子はトリス（8-ヒドロキシキノリナト）アルミニウム錯体（Alq）を電子輸送材料として用い、正孔輸送材料（アミン化合物）と積層させることにより、従来の単層型素子に比べて発光特性を大幅に向上させている。

【0003】上記積層型発光素子の発光効率を更に改良する手段として、蛍光色素をドーピングする方法が知られている。例えば、ジャーナル オブ アプライド フィジックス 65巻、3610頁、1989年に記載のクマリン色素をドーピングした発光素子はドーピングしない素子に比べて発光効率が大幅に向上している。この場合、用いる30 蛍光性化合物の種類を変えることにより所望の波長の光を取り出すことが可能であるが、電子輸送材料としてAlqを用いた場合、高輝度を得るために駆動電圧を高くすると、ドーピングした蛍光性化合物の発光の他にAlqの*

* 緑色発光が観測されてくるため、青色や赤色発光させる場合には色純度の低下が問題になり、色純度を低下させないホスト材料の開発が望まれている。

【0004】また、これまで開発されてきた発光素子は、素子構成、材料の改善等により、発光強度、耐久性等が改良されてきているものの、様々な用途展開を考えた場合、未だ十分な性能を有していない。例えば、Alqなどの従来の金属錯体は、電界発光時に化学的に不安定であり、また陰極との密着も悪く、素子劣化の問題も10 解決されていない。さらにAlqの場合、オキシンを配位に用いた錯体であり、その素材安全性も懸念されており、安全性上問題のない発光素子用の電子輸送材料の開発が求められている。

【0005】一方、有機発光素子において高輝度発光を実現しているものは有機物質を真空蒸着によって積層している素子であるが、製造工程の簡略化、加工性、大面積化等の観点から塗布方式による素子作製が望ましい。しかしながら、従来の塗布方式で作製した素子では発光輝度、発光効率の面で蒸着方式で作製した素子に劣っており、高輝度、高効率発光化が大きな課題となっていた。

【0006】

【発明が解決しようとする課題】本発明の目的は、発光特性が良好な発光素子およびそれを可能にする発光素子用材料の提供にある。

【0007】

【課題を解決するための手段】この課題は下記手段によって達成された。

【0008】〔1〕下記一般式（I）で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体であることを特徴とする発光素子材料。

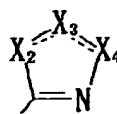
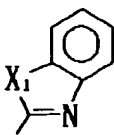
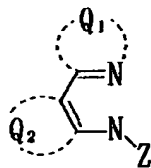
【0009】

【化7】

一般式（I）

一般式（II）

一般式（III）



【0010】（式中、Q₁は含窒素芳香族6員環、一般式（II）または一般式（III）で表される環を形成するに必要な原子群を表す。X₁、X₂、X₃、X₄は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、置換または無置換の炭素原子、セレン原子を表す。X₃、X₄の少なくとも一方は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、セレン原子である。Q₂は芳香族環を形成するに必要な原子群を表す。Q₁とQ₂が結合して芳香族縮環構造を取ることはない。Zは、SO₂ R※50

※1、COR₂またはPOR₃（R₄）（R₁、R₂、R₃およびR₄はそれぞれ脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基またはヘテロ環オキシ基を表す。）を表す。）

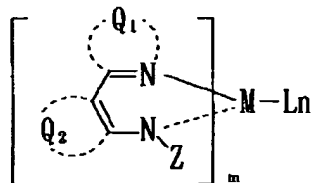
〔2〕一般式（I）で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体であることを特徴とする〔1〕に記載の発光素子材料。

〔3〕金属錯体が下記一般式（K-I）で表されることを特徴とする〔2〕記載の発光素子材料。

【0011】

【化8】

一般式 (K-I)



【0012】(式中、 Q_1 、 Q_2 、及び Z は一般式(1)のそれらと同義である。 M は金属イオンを表す。 m は1~3の整数を表す。 L は配位子を表す。 n は $m+n=2$ または3となる整数を表す。)

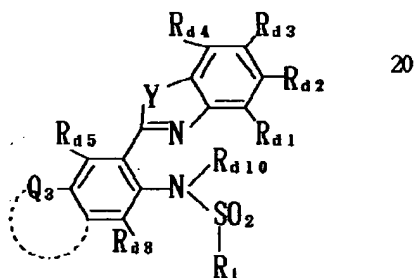
〔4〕 M が2価または3価の金属イオンであることを特徴とする〔3〕記載の発光素子材料。

〔5〕下記一般式(IV)で表される部分構造またはその互変異性体を有する化合物。

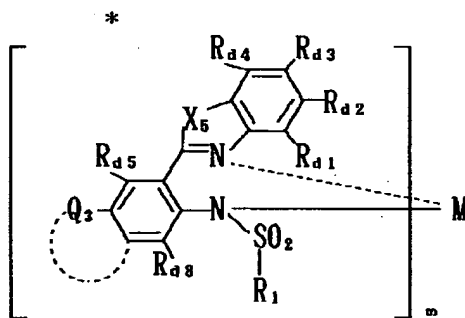
【0013】

【化9】

一般式 (IV)



一般式 (K-IV)



【0016】(式中、 R_1 は脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリーロキシ基、またはヘテロ環オキシ基を表す。 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、および R_{d8} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。 X_5 は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、 CH_2 もしくは置換された炭素原子、セレン原子を表す。 Q_3 は環を形成するのに必要な原子群を表す。 M は金属イオンを表す。 m は1~※

*【0014】(式中、 R_1 は脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリーロキシ基、またはヘテロ環オキシ基を表す。 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、 R_{d8} 、および R_{d10} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。 Y は酸素原子、硫黄原子、 $N-R$ (R は置換基を表す。)、 CH_2 もしくは置換された炭素原子、セレン原子を表す。 Q_3 は環を形成するのに必要な原子群を表す。)

〔6〕一般式(IV)で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体。

〔7〕一般式(IV)で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体であることを特徴とする発光素子材料。

〔8〕下記一般式(K-IV)で表される金属錯体。

【0015】

【化10】

※3の整数を表す。)

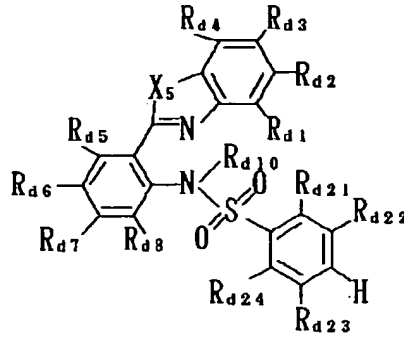
〔9〕一般式(K-IV)で表される金属錯体であることを特徴とする発光素子材料。

〔10〕下記一般式(V)で表される部分構造またはその互変異性体を有する化合物。

【0017】

【化11】

一般式 (V)



【0018】(式中、 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、 R_{d6} 、 R_{d7} 、 R_{d8} 、 R_{d10} 、 R_{d21} 、 R_{d22} 、 R_{d23} および R_{d24} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。 X_5 は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、 CH_2 もしくは置換された炭素原子、セレン原子を表す。)

〔11〕一般式 (V) で表される部分構造を有する化合物*
一般式 (K-V)

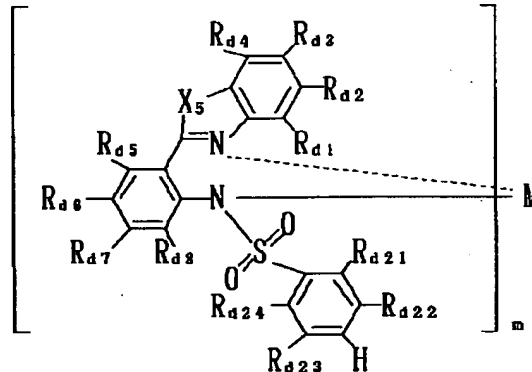
*物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体。

〔12〕一般式 (V) で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体であることを特徴とする発光素子材料。

〔13〕下記一般式 (K-V) で表される金属錯体。

【0019】

〔化12〕



【0020】(式中、 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、 R_{d6} 、 R_{d7} 、 R_{d8} 、 R_{d21} 、 R_{d22} 、 R_{d23} および R_{d24} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。 X_5 は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、 CH_2 もしくは置換された炭素原子、セレン原子を表す。 M は金属イオンを表す。 m は1~3の整数を表す。)

〔14〕一般式 (K-V) で表される金属錯体であることを特徴とする発光素子材料。

〔15〕一対の電極間に発光層もしくは発光層を含む複数の有機化合物薄層を形成した発光素子において、少なくとも一層が〔1〕~〔14〕のいずれか1つに記載の化合物または発光素子材料を含有する層であることを特徴とする発光素子。

〔16〕一対の電極間に発光層もしくは発光層を含む複数の有機化合物薄層を形成した発光素子において、少なくとも一層が〔1〕~〔14〕のいずれか1つに記載の化合物または発光素子材料をポリマーに分散した層であることを特徴とする発光素子。

〔17〕一対の電極間に発光層もしくは発光層を含む複

※数の有機化合物薄層を形成した発光素子において、上記発光層が〔1〕~〔14〕のいずれか1つに記載化合物または発光素子材料を含有する層であることを特徴とする発光素子。

〔18〕一対の電極間に発光層もしくは発光層を含む複数の有機化合物薄層を形成した発光素子において、発光層と陰極との間の少なくとも一層が〔1〕~〔14〕のいずれか1つに記載の化合物または発光素子材料を含有する層であることを特徴とする発光素子。

【0021】

【発明の実施の形態】以下、本発明について詳細に説明する。まず、一般式 (I) で表される部分構造を有する化合物について説明する。 Q_1 は含窒素芳香族6員環、一般式 (II) で表される環、または、一般式 (III) で表される環を形成するに必要な原子群を表す。 X_1 、 X_2 、 X_3 、 X_4 は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、置換または無置換の炭素原子、セレン原子を表す。 X_3 、 X_4 の少なくとも一方は酸素原子、硫黄原子、置換または無置換の窒素原子、セレン原

子である。X₂、X₃、X₄上の置換基同士が結合し、縮合環を形成しても良い。Q₁とQ₂が結合して芳香族縮環構造を取ることはない。

【0022】Q₁で形成される含窒素ヘテロ環は、好ましくは炭素数2〜30、より好ましくは炭素数3〜20、さらに好ましくは炭素数3〜15、特に好ましくは炭素数4〜10である。Q₁で形成される含窒素芳香族6員環としては、例えばピリジン、キノリン、ピラジン、ピリダジン、イソキノリン、キノキサリンなどが挙げられ、好ましくはピリジン、キノリン、ピラジンでありより好ましくはピリジン、ピラジンであり、さらに好ましくは、ピリジンである。一般式(II)で表される環としては、例えばベンゾオキサゾール、ベンゾイミダゾール、ベンゾチアゾール、インドレニンが挙げられ、好ましくは、ベンゾオキサゾール、ベンゾイミダゾールであり、より好ましくはベンゾオキサゾールである。一般式(III)で表される環としては、例えばピラゾール、オキサジアゾール、ピラゾロトリアゾール、イソオキサゾール、トリアゾール、チアジアゾール、ピロロトリアゾール、イミダゾトリアゾールなどが挙げられ、好ましくは、オキサジアゾール、トリアゾール、ピラゾロトリアゾール、ピロロトリアゾール、チアジアゾールであり、より好ましくは、オキサジアゾール、トリアゾールであり、さらに好ましくはオキサジアゾールである。

【0023】Q₁で形成される含窒素ヘテロ環は好ましくは一般式(II)または一般式(III)で表されるヘテロ環であり、より好ましくは、一般式(II)で表されるヘテロ環である。

【0024】Q₂は芳香族環を形成するに必要な原子群を表す。Q₁とQ₂が結合して芳香族縮環構造を取ることはない。Q₂で形成される芳香族環は芳香族炭化水素環、芳香族ヘテロ環のいずれでもよく、例えばベンゼン、ナフタレン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、チアゾール、イソチアゾール、オキサゾール、イソオキサゾール、セレナゾール、トリアジンなどが挙げられ、好ましくはベンゼン、ナフタレン、ピリジン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジンであり、より好ましくはベンゼン、ナフタレン、ピリジンであり、更に好ましくはベンゼン、ナフタレンである。

【0025】Q₁で形成される環、Q₂で形成される芳香族環は、置換基を有してもよく、置換基としては例えばアルキル基(好ましくは炭素数1〜30、より好ましくは炭素数1〜20、特に好ましくは炭素数1〜10であり、例えばメチル、エチル、iso-プロピル、tert-ブチル、n-オクチル、n-デシル、n-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数2〜30、より好ましくは炭素数2〜20、特に好ましくは炭素数2〜10であり、例えばビニル、アリ

ル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。)、アルキニル基(好ましくは炭素数2〜30、より好ましくは炭素数2〜20、特に好ましくは炭素数2〜10であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。)、アリール基(好ましくは炭素数6〜30、より好ましくは炭素数6〜20、特に好ましくは炭素数6〜12であり、例えばフェニル、p-メチルフェニル、ナフチル、アントラニルなどが挙げられる。)、アミノ基(好ましくは炭素数0〜30、より好ましくは炭素数0〜20、特に好ましくは炭素数0〜10であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、ジフェニルアミノ、ジトリルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシ基(好ましくは炭素数1〜30、より好ましくは炭素数1〜20、特に好ましくは炭素数1〜10であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシルオキシなどが挙げられる。)、アリールオキシ基(好ましくは炭素数6〜30、より好ましくは炭素数6〜20、特に好ましくは炭素数6〜12であり、例えばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。)、ヘテロアリールオキシ基(好ましくは炭素数1〜30、より好ましくは炭素数1〜20、特に好ましくは炭素数1〜12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジリルオキシ、ピリミジリルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。)、アシル基(好ましくは炭素数1〜30、より好ましくは炭素数1〜20、特に好ましくは炭素数1〜12であり、例えばアセチル、ベンゾイル、ホルミル、ヒバロイルなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニル基(好ましくは炭素数2〜30、より好ましくは炭素数2〜20、特に好ましくは炭素数2〜12であり、例えばメトキシカルボニル、エトキシカルボニルなどが挙げられる。)、アリールオキシカルボニル基(好ましくは炭素数7〜30、より好ましくは炭素数7〜20、特に好ましくは炭素数7〜12であり、例えばフェニルオキシカルボニルなどが挙げられる。)、アシルオキシ基(好ましくは炭素数2〜30、より好ましくは炭素数2〜20、特に好ましくは炭素数2〜10であり、例えばアセトキシ、ベンゾイルオキシなどが挙げられる。)、アシルアミノ基(好ましくは炭素数2〜30、より好ましくは炭素数2〜20、特に好ましくは炭素数2〜10であり、例えばアセチルアミノ、ベンゾイルアミノなどが挙げられる。)、アルコキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数2〜30、より好ましくは炭素数2〜20、特に好ましくは炭素数2〜12であり、例えばメトキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、アリールオキシカルボニルアミノ基(好ましくは炭素数7〜30、より好ましくは炭素数7〜20、特に好ましくは炭素数7〜12であり、例えばフェニルオキシカルボニルアミノなどが挙げられる。)、スルホニルアミノ基(好ましくは炭素数1〜3

0、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルホニルアミノ、ベンゼンスルホニルアミノなどが挙げられる。)、スルファモイル基(好ましくは炭素数0~30、より好ましくは炭素数0~20、特に好ましくは炭素数0~12であり、例えばスルファモイル、メチルスルファモイル、ジメチルスルファモイル、フェニルスルファモイルなどが挙げられる。)、カルバモイル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばカルバモイル、メチルカルバモイル、ジエチルカルバモイル、フェニルカルバモイルなどが挙げられる。)、アルキルチオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基(好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロアリールチオ基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミダゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。)、スルホニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメシル、トシルなどが挙げられる。)、スルフィニル基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメタンスルフィニル、ベンゼンスルフィニルなどが挙げられる。)、ウレイド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばウレイド、メチルウレイド、フェニルウレイドなどが挙げられる。)、リン酸アミド基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばジエチルリン酸アミド、フェニルリン酸アミドなどが挙げられる。)、ヒドロキシ基、メルカプト基、ハロゲン原子(例えばフッ素原子、塩素原子、臭素原子、ヨウ素原子)、シアノ基、スルホ基、カルボキシ基、ニトロ基、ヒドロキサム酸基、スルフィノ基、ヒドラジノ基、イミノ基、ヘテロ環基(好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~12であり、ヘテロ原子としては、例えば窒素原子、酸素原子、硫黄原子、具体的には例えばイミダゾリル、ピリジル、キノリル、フリル、チエニル、ピペリジル、モルホリノ、ベンズオキサゾリル、ベンズイミダゾリル、ベンズチアゾリルなどが挙げられる。)、シリル基(好ましくは炭素数3~40、より好ましくは炭素数3~30、特に好ましくは炭素数3~24であり、例えばトリメチルシリル、トリフェニルシリルなどが挙げられる。))などが挙げられる。これら

の置換基は更に置換されてもよい。また置換基が二つ以上ある場合は、同じでも異なってもよい。

【0026】置換基として好ましくは、アルキル基、アルケニル基、アルキニル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヘテロ環基であり、より好ましくはアルキル基、アルケニル基、アリール基、ハロゲン原子、シアノ基、ヘテロ環基であり、更に好ましくはアルキル基、アルケニル基、アリール基、ヘテロ環基であり、特に好ましくはアルキル基、アルケニル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基である。

【0027】Zは、 SO_2R_1 、 COR_2 または $\text{POR}_3(\text{R}_4)$ (R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 はそれぞれ脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基またはヘテロ環オキシ基を表す。)を表す。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 で表される脂肪族炭化水素基として好ましくは、アルキル基(好ましくは炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~12、特に好ましくは炭素数1~8であり、例えばメチル、エチル、iso-プロピル、tert-ブチル、n-オクチル、n-デシル、n-ヘキサデシル、シクロプロピル、シクロペンチル、シクロヘキシルなどが挙げられる。)、アルケニル基(好ましくは炭素数2~20、より好ましくは炭素数2~12、特に好ましくは炭素数2~8であり、例えばビニル、アリル、2-ブテニル、3-ペンテニルなどが挙げられる。)、アルキニル基(好ましくは炭素数2~20、より好ましくは炭素数2~12、特に好ましくは炭素数2~8であり、例えばプロパルギル、3-ペンチニルなどが挙げられる。)であり、より好ましくはアルキル基、アルケニル基である。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 で表されるアリール基として好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニル、4-メチルフェニル、4-メトキシフェニル、3-トリフルオロメチルフェニル、ペンタフルオロフェニル、1-ナフチル、2-ナフチルなどが挙げられる。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 で表されるヘテロ環基は、単環または縮環のヘテロ環基(好ましくは炭素数1~20、好ましくは炭素数1~12、更に好ましくは炭素数2~10のヘテロ環基)であり、好ましくは窒素原子、酸素原子、硫黄原子、セレン原子の少なくとも一つを含む芳香族ヘテロ環基である。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 で表されるヘテロ環基の具体例としては、例えばピロリジン、ピペリジン、ピロール、フラン、チオフェン、イミダゾリン、イミダゾール、ベンズイミダゾール、ナフトイミダ

ゾール、チアゾリジン、チアゾール、ベンズチアゾール、ナフトチアゾール、イソチアゾール、オキサゾリン、オキサゾール、ベンズオキサゾール、ナフトオキサゾール、イソオキサゾール、セレナゾール、ベンズセレナゾール、ナフトセレナゾール、ピリジン、キノリン、イソキノリン、インドール、インドレニン、ピラゾール、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、インダゾール、アリン、フトラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、アテリジン、フェナントリジン、アテリジン、フェナントロリン、テトラザインデンなどが挙げられ、好ましくはフラン、チオフェン、ピリジン、キノリン、ピラジン、ピリミジン、ピリダジン、トリアジン、フトラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリンであり、より好ましくはフラン、チオフェン、ピリジン、キノリンである。

【0028】 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 で表されるアミノ基として好ましくは、炭素数0~20、より好ましくは炭素数1~16、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばアミノ、メチルアミノ、ジメチルアミノ、ジエチルアミノ、ジベンジルアミノ、フェニルアミノ、ジフェニルアミノなどが挙げられる。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 で表されるアルコキシ基として好ましくは、炭素数1~20、より好ましくは炭素数1~16、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 で表されるアリールオキシ基として好ましくは、炭素数6~20、より好ましくは炭素数6~16、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルオキシ、4-メトキシフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 で表されるヘテロ環オキシ基として好ましくは、炭素数1~20、より好ましくは炭素数2~16、特に好ましくは炭素数2~12であり、例えばピリジルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。

【0029】 R_1 、 R_2 、 R_3 、 R_4 は置換基を有してもよく、置換基としては例えば一般式(I)における Q_1 、 Q_2 で形成される環の置換基として挙げたものが適用でき、また好ましい置換基も同様である。 R_1 、 R_2 として好ましくは脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基である。 R_3 、 R_4 として好ましくは脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アルコキシ基、アリールオキシ基、ヘテロ環オキシ基であり、より好ましくはアルコキシ基、アリールオキシ基であり、更に好ましくはアリールオキシ基である。

【0030】 Z として好ましくは $SO_2 R_1$ であり、より好ましくは $SO_2 R_5$ (R_5 は脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基)であり、更に好ましくは $SO_2 R_6$ (R_6 は脂肪族炭化水素基、アリール基、芳香族ヘ

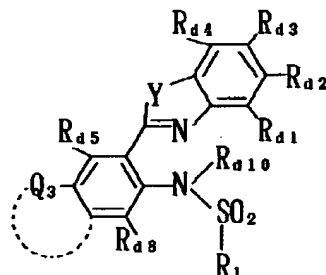
テロ環基)であり、特に好ましくは $SO_2 R_7$ (R_7 はアリール基)である。

【0031】一般式(I)で表される部分構造を有する化合物のうち好ましくは、一般式(IV)、または(V)で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体である。まず、一般式(IV)について詳細に説明する。

【0032】

【化13】

一般式(IV)



【0033】(式中、 R_1 は脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、またはヘテロ環オキシ基を表す。 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、 R_{d8} 、および R_{d10} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。 Y は酸素原子、硫黄原子、 $N-R$ (R は置換基を表す。)、 CH_2 もしくは置換された炭素原子、またはセレン原子を表す。 Q_3 は環を形成するのに必要な原子群を表す。)

【0034】 R_1 は一般式(I)におけるそれと同義であり、また好ましい範囲も同様である。

【0035】 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} および R_{d8} はそれぞれ水素原子または置換基を表し、置換基としては例えば、一般式(I)における Q_1 、 Q_2 で形成される環の置換基として挙げたものが適用でき、 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} および R_{d8} として好ましくは、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アラルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ヘテロ環基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アシル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヘテロ環基であり、更に好ましくは水素原子、アルキル基、シアノ基、ハロゲン原子であり、特に好ましくは水素原子である。 R_{d10} は水素原子または置換基を表し、置換基としては例えば、一般式(I)における Q_1 、 Q_2 で形成される環の置換基として挙げたものが適用でき、 R_{d10} として好ましくは水素原子、アルキル基、アルケニル基、アラルキル基、ア

リール基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基であり、更に好ましくは水素原子、メチル基、エチル基であり、特に好ましくは水素原子である。

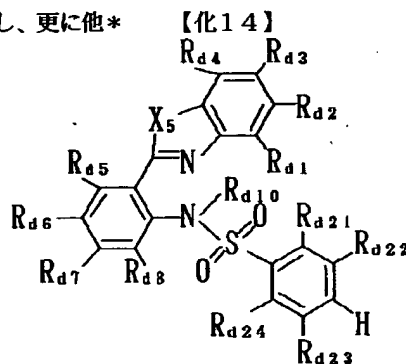
【0036】Yは酸素原子、硫黄原子、N-R (Rは置換基を表す。)、CH₂ もしくは置換された炭素原子、またはセレン原子を表す。Rは一般式 (I) におけるQ₁、Q₂ で形成される環の置換基として挙げたものが適用でき、好ましくは脂肪族炭化水素基、アリール基、ヘテロ環基であり、より好ましくはアルキル基、アリール基、芳香族ヘテロ環基であり、更に好ましくはアリール基、芳香族ヘテロ環基であり、特に好ましくはアリール基 (例えば、フェニル基、o-メチルフェニル基、m-メチルフェニル基、ナフチル基等がある。) である。Yとして好ましくは酸素原子、硫黄原子、N-Rであり、より好ましくは、酸素原子、硫黄原子、N-R_Y (R_Yはアリール基、またはヘテロ環基を表す。) であり、特に好ましくは酸素原子である。

【0037】Q₃ は環を形成するのに必要な原子群を表し、Q₃ が形成する環の具体例としては不飽和の、炭化水素環とヘテロ環が挙げられる。また、これらは単環であってもよいし、さらに他の環と縮合環を形成してもよい。

【0038】Q₃ が形成する不飽和炭化水素環は芳香族炭化水素環でも非芳香族炭化水素環でもよく、好ましくは芳香族炭化水素環 (好ましくは炭素数6~30であり、より好ましくは炭素数6~24、さらに好ましくは炭素数6~20であり、特に好ましくはベンゼン環、ナフタレン環であり、最も好ましくはベンゼン環である。)

【0039】Q₃ が形成するヘテロ環基は、N、OまたはS原子を少なくとも一つを含む3ないし10員のヘテロ環基であり、これらは単環であってもよいし、更に他*

一般式 (V)



【0042】(式中、R_{d1}、R_{d2}、R_{d3}、R_{d4}、R_{d5}、R_{d6}、R_{d7}、R_{d8}、R_{d10}、R_{d21}、R_{d22}、R_{d23} およびR_{d24} はそれぞれ水素原子または置換基を表す。X₅ は酸素原子、硫黄原子、置換もしくは無置換の窒素原子、CH₂ もしくは置換された炭素原子、またはセレン

*の環と縮合環を形成してもよい。ヘテロ環基として好ましくは、芳香族ヘテロ環基であり、より好ましくは窒素原子を含む芳香族ヘテロ環基である。ヘテロ環の具体例としては、例えばピロリジン、ピペリジン、ピペラジン、モルフォリン、チオフェン、フラン、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ヒリジン、ヒラジン、ヒリダジン、トリアゾール、トリアジン、インドール、インダゾール、プリン、チアゾリン、チアゾール、チアジアゾール、オキサゾリン、オキサゾール、オキサジアゾール、キノリン、イソキノリン、フタラジン、ナフチリジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、アテリジン、アクリジン、フェナントロリン、フェナジン、ベンズイミダゾール、ベンズオキサゾール、ベンズチアゾール、ベンゾトリアゾール、テトラザインデンなどが挙げられる。ヘテロ環として好ましくは、ピロール、イミダゾール、ピラゾール、ヒリジン、ヒラジン、ヒリダジン、トリアゾール、トリアジン、インドール、インダゾール、チアジアゾール、オキサジアゾール、キノリン、フタラジン、キノキサリン、キナゾリン、シンノリン、チアゾール、オキサゾール、ベンズイミダゾール、ベンズオキサゾール、ベンズチアゾール、ベンゾトリアゾールであり、より好ましくはイミダゾール、ヒリジン、キノリン、チアゾール、オキサゾール、ベンズイミダゾール、ベンズオキサゾール、ベンズチアゾール、ベンゾトリアゾールであり、更に好ましくは、ヒリジン、キノリンである。

【0040】Q₃ として好ましくは芳香族炭化水素環、芳香族ヘテロ環であり、より好ましくは炭素数6~20の芳香族炭化水素環、窒素原子を含む芳香族ヘテロ環であり、更に好ましくはベンゼン環、ヒリジン環キノリン環である。次に、一般式 (V) について詳細に説明する。

【0041】

【化14】

※原子を表す。)

【0043】R_{d1}、R_{d2}、R_{d3}、R_{d4}、R_{d5}、R_{d6}およびR_{d10} はそれぞれ一般式 (IV) と同義であり、また好ましい範囲も同様である。X₅ は一般式 (I) におけるX₁と同義であり、また好ましい範囲も同様である。

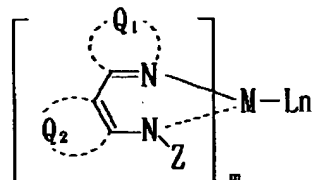
【0044】 R_{d6} 、 R_{d7} 、 R_{d21} 、 R_{d22} 、 R_{d23} および R_{d24} はそれぞれ水素原子または置換基を表し、置換基としては例えば、一般式 (I) における Q_1 、 Q_2 で形成される環の置換基として挙げたものが適用でき、 R_{d6} 、 R_{d7} 、 R_{d21} 、 R_{d22} 、 R_{d23} および R_{d24} として好ましくは、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アラルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチオ基、スルホニル基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ヘテロ環基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アシル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヘテロ環基であり、更に好ましくは水素原子、アルキル基、シアノ基、ハロゲン原子であり、特に好ましくは水素原子である。

【0045】一般式 (I) で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子とする金属錯体のうち、好ましくは下記一般式 (K-I) で表される金属錯体である。以下に一般式 (K-I) について詳細に説明する。

【0046】

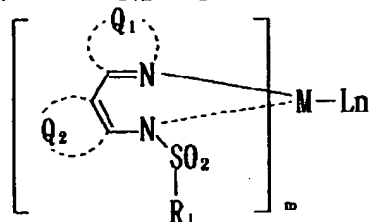
【化15】

一般式 (K-I)



【0047】(式中、 Q_1 、 Q_2 および Z は、それぞれ一般式 (I) におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。 M は金属イオンを表し、好ましくは2価または3価の金属イオンである。 M で表される金属イオンの具体例としては、ベリリウムイオン、マグネシウムイオン、カルシウムイオン、アルミニウムイオン、ガリウムイオン、インジウムイオン、ジルコニウムイオン、亜鉛イオン、鉄イオン、コバルトイオン、ニッケルイオン、銅イオン、白金イオン、パラジウムイオン、ストロンチウムイオン、スカンジウムイオン、テル*

一般式 (K-Ia)



【0051】(式中、 Q_1 、 Q_2 および R_1 は、それぞれ一般式 (I) におけるそれらと同義であり、また好ま

*ビウムイオンなどが挙げられ、好ましくはベリリウムイオン、マグネシウムイオン、アルミニウムイオン、ガリウムイオン、亜鉛イオンであり、より好ましくはベリリウムイオン、アルミニウムイオン、亜鉛イオンであり、更に好ましくは亜鉛イオンである。 m は1~3の整数を表し、好ましくは金属錯体が中性となるような整数である。

【0048】 L は配位子を表す。 L で表される配位子として好ましくは一般式 (I) で表される配位子、アルコキシ基 (好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~10であり、例えばメトキシ、エトキシ、ブトキシ、2-エチルヘキシロキシなどが挙げられる。)、アリールオキシ基 (好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルオキシ、1-ナフチルオキシ、2-ナフチルオキシなどが挙げられる。)、ヘテロアリールオキシ基 (好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルオキシ、ピラジリルオキシ、ピリミジリルオキシ、キノリルオキシなどが挙げられる。)、アルキルチオ基 (好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばメチルチオ、エチルチオなどが挙げられる。)、アリールチオ基 (好ましくは炭素数6~30、より好ましくは炭素数6~20、特に好ましくは炭素数6~12であり、例えばフェニルチオなどが挙げられる。)、ヘテロアリールチオ基 (好ましくは炭素数1~30、より好ましくは炭素数1~20、特に好ましくは炭素数1~12であり、例えばピリジルチオ、2-ベンズイミゾリルチオ、2-ベンズオキサゾリルチオ、2-ベンズチアゾリルチオなどが挙げられる。) であり、より好ましくは一般式 (I) で表される配位子、アリールオキシ基、ヘテロアリールオキシ基であり、更に好ましくは一般式 (I) で表される配位子、アリールオキシ基である。 n は $m+n=2$ または3となる整数を表し、好ましくは0または1である。

【0049】一般式 (K-I) で表される化合物のうち、好ましくは一般式 (K-Ia) で表される化合物である。

【0050】

【化16】

21

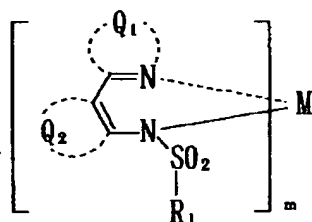
しい範囲も同様である。M、m、Lおよびnは、それぞれ一般式(K-I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。)

【0052】一般式(K-I)で表される化合物のうち、より好ましくは一般式(K-Ib)で表される化合物である。

【0053】

【化17】

一般式(K-Ib)



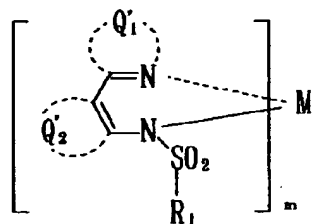
【0054】(式中、Q1、Q2およびR1は、それぞれ一般式(I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。Mおよびmは、それぞれ一般式(K-I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。)

一般式(K-I)で表される化合物のうち、更に好ましくは一般式(K-Ic)で表される化合物である。

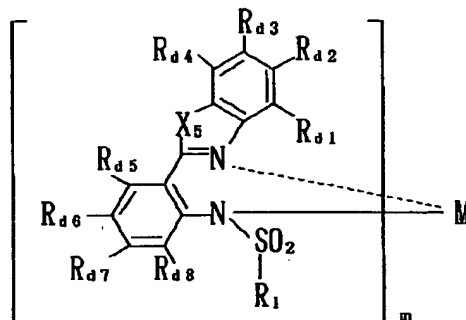
【0055】

【化18】

一般式(K-Ic)



一般式(K-Id)



【0059】(式中、R1は一般式(I)におけるそれと同義であり、また好ましい範囲も同様である。Mおよびmは、それぞれ一般式(K-I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。X5、Rd1、Rd2、Rd3、Rd4、Rd5、Rd6、Rd7およびRd8は、それぞれ一般式(V)におけるそれらと同義であ ※

22

*【0056】(式中、R1は一般式(I)におけるそれと同義であり、また好ましい範囲も同様である。Mおよびmは、それぞれ一般式(K-I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。Q1'は前記Q1と同義である。Q2'は6員の芳香族環を形成するために必要な原子群を表す。Q2'で形成される6員の芳香族環としては、例えばベンゼン、ナフタレン、ピリジン、ピラジン、ヒリミジン、ヒリダジン、トリアジンなどが挙げられ、好ましくはベンゼン、ナフタレン、ピリジン、ピラジン、ヒリミジン、ヒリダジンであり、より好ましくはベンゼン、ナフタレン、ピリジンであり、更に好ましくはベンゼン、ナフタレンである。Q2'で形成される6員の芳香族環は置換基を有してもよく、置換基としては例えば一般式(I)におけるQ1、Q2で形成される環の置換基として挙げたものが適用でき、また好ましい置換基も同様である。これらの置換基は可能な場合には連結して環を形成してもよい。)

【0057】一般式(K-I)で表される化合物のうち、特に好ましくは一般式(K-Id)で表される化合物である。

【0058】

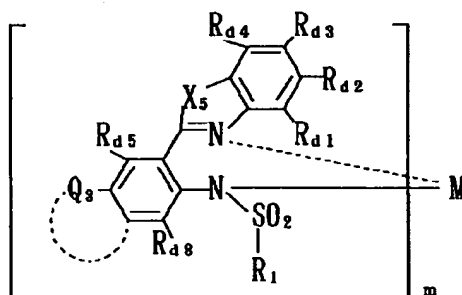
【化19】

※り、また好ましい範囲も同様である。) 一般式(K-Id)で表される化合物のうち好ましくは、一般式(K-IV)、(K-V)で表される化合物である。

【0060】

【化20】

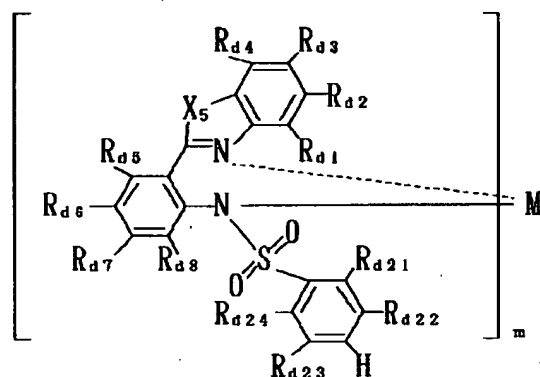
一般式 (K-IV)



【0061】

* * 【化21】

一般式 (K-V)



【0062】まず、一般式 (K-IV) について詳細に説明する。

【0063】(式中、R₁、R_{d1}、R_{d2}、R_{d3}、R_{d4}、R_{d5}、R_{d8}およびQ₃はそれぞれ一般式 (I) におけるそれらと同義であり、また、好ましい範囲も同様である。Mおよびmはそれぞれ一般式 (I) におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。X₅は ※

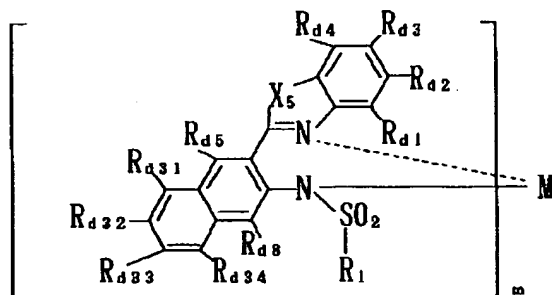
一般式 (K-IV-a)

※一般式 (K-Id) におけるそれと同義であり、また好ましい範囲も同様である。)

【0064】一般式 (K-IV) で表される化合物のうち好ましくは一般式 (K-IV-a) である。

【0065】

【化22】



【0066】(式中、R₁、R_{d1}、R_{d2}、R_{d3}、R_{d4}、R_{d5}、R_{d8}およびX₅はそれぞれ一般式 (K-IV) におけるそれらと同義であり、また、好ましい範囲も同様である。Mおよびmは一般式 (I) におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。R_{d31}、R_{d32}、R_{d33}、およびR_{d34}は水素原子または置換基を表し、置換基としては一般式 (I) におけるQ₁、Q₂で形成される環の置換基として挙げたものが適用でき

★R_{d31}、R_{d32}、R_{d33}、およびR_{d34}として好ましくは、水素原子、アルキル基、アルケニル基、アラルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アリールオキシ基、アシル基、アルコキシカルボニル基、アリールオキシカルボニル基、アシルオキシ基、アシルアミノ基、アルコキシカルボニルアミノ基、アリールオキシカルボニルアミノ基、スルホニルアミノ基、スルファモイル基、カルバモイル基、アルキルチオ基、アリールチ

オ基、スルホニル基、ヒドロキシ基、ハロゲン原子、シアノ基、ヘテロ環基であり、より好ましくは水素原子、アルキル基、アリール基、アミノ基、アルコキシ基、アシル基、ハロゲン原子、シアノ基、ヘテロ環基であり、更に好ましくは水素原子、アルキル基、シアノ基、ハロ*

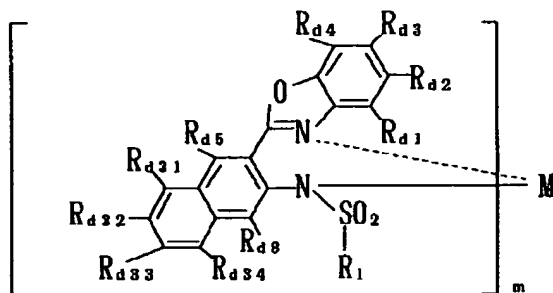
一般式 (K-IV-b)

* ゲン原子であり、特に好ましくは水素原子である。)

【0067】一般式 (K-IV) で表される化合物のうちより好ましくは一般式 (K-IV-b) である。

【0068】

【化23】



【0069】(式中、R₁、R_{d1}、R_{d2}、R_{d3}、R_{d4}、R_{d5}およびR_{d8}はそれぞれ一般式 (IV) におけるそれらと同義であり、また、好ましい範囲も同様である。Mおよびmは一般式 (I) におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。R_{d31}、R_{d32}、R_{d33}、およびR_{d34}はそれぞれ一般式 (K-IV-a) と

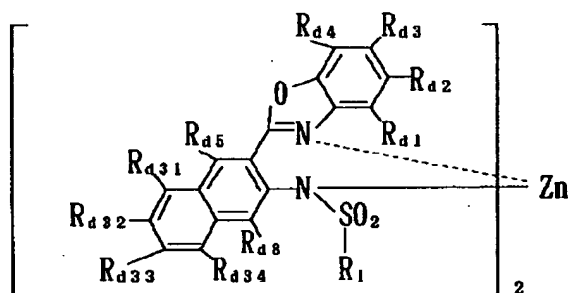
一般式 (K-IV-c)

※同義であり、また、この好ましい範囲も同様である。)

【0070】一般式 (K-IV) で表される化合物のうち更に好ましくは一般式 (K-IV-c) である。

【0071】

【化24】



【0072】(式中、R₁、R_{d1}、R_{d2}、R_{d3}、R_{d4}、R_{d5}およびR_{d8}はそれぞれ一般式 (IV) におけるそれらと同義であり、また、好ましい範囲も同様である。R_{d31}、R_{d32}、R_{d33}、およびR_{d34}はそれぞれ一般式 (K-IV-a) と同義であり、また、この好ましい範囲も同様である。)

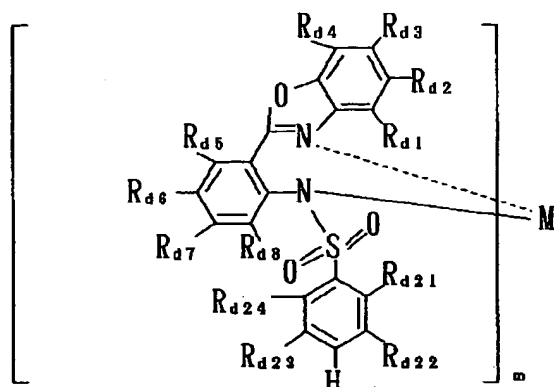
★_{d24} およびX₅はそれぞれ一般式 (V) におけるそれらと同義であり、また、好ましい範囲も同様である。Mおよびmは一般式 (I) におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。一般式 (K-V) で表される化合物のうち好ましくは一般式 (K-V-a) で表される化合物である。

【0073】次に一般式 (K-V) について詳細に説明する。一般式 (K-V) 中、R_{d1}、R_{d2}、R_{d3}、R_{d4}、R_{d5}、R_{d6}、R_{d7}、R_{d8}、R_{d21}、R_{d22}、R_{d23}、R★

【0074】

【化25】

一般式 (K-V-a)



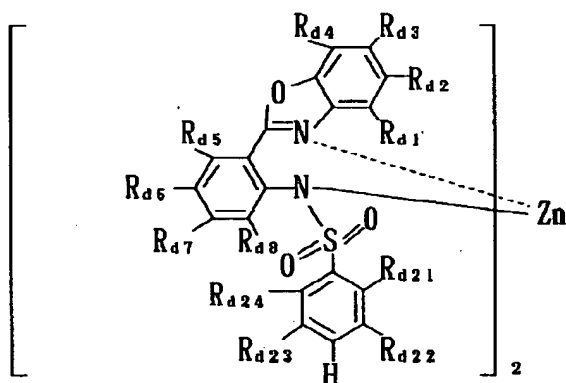
【0075】(式中、 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、 R_{d6} 、 R_{d7} 、 R_{d8} 、 R_{d21} 、 R_{d22} 、 R_{d23} および R_{d24} はそれぞれ一般式(V)におけるそれらと同義であり、また、好ましい範囲も同様である。 M および m は一般式(I)におけるそれらと同義であり、また好ましい範囲も同様である。)

*【0076】一般式(K-V)で表される化合物のうちより好ましくは一般式(K-V-b)で表される化合物である。

【0077】

【化26】

一般式 (K-V-b)



【0078】(式中、 R_{d1} 、 R_{d2} 、 R_{d3} 、 R_{d4} 、 R_{d5} 、 R_{d6} 、 R_{d7} 、 R_{d8} 、 R_{d21} 、 R_{d22} 、 R_{d23} および R_{d24} はそれぞれ一般式(V)におけるそれらと同義であり、また、好ましい範囲も同様である。)

【0079】なお、一般式(I)、(K-I)、(K-Ia)、(K-Ib)、(K-Ic)、(K-Id)、(IV)、(K-IV)、(K-IV-a)、(K-IV-b)、(K-IV-c)、(V)、(K-V)、(K-V-a)、(K-V-b)で表される化合物は、低分子量化合物であってもよいし、一般式(I)、(K-I)、(K-Ia)、(K-Ib)、(K-Ic)、(K-Id)、(IV)、(K-IV)、(K-IV-a)、(K-IV-b)、(K-IV-c)、(V)、(K-V)、(K-V-a)、(K-V-b)で表される残基がポリマー主鎖に接続された高分子量化合物もしくは、一般式(I)、(K-I)、(K-Ia)、(K-Ib)、(K-Ic)、(K-Id)、(IV)、(K-IV)、(K-IV-a)、(K-IV-b)、※50

※ (K-IV-c)、(V)、(K-V)、(K-V-a)、(K-V-b)の骨格を主鎖にもつ高分子量化合物であってもよい。高分子量化合物の場合は、ホモポリマーであっても良いし、他のモノマーとの共重合体であっても良い。また、一般式(I)：(K-I)、(K-Ia)、(K-Ib)、(K-Ic)、(K-Id)、(IV)、(K-IV)、(K-IV-a)、(K-IV-b)、(K-IV-c)、(V)、(K-V)、(K-V-a)、(K-V-b)および、以下に示すこれらの具体的化合物例は便宜的に極限構造式で表しているが、その互変異性体であってもよい。

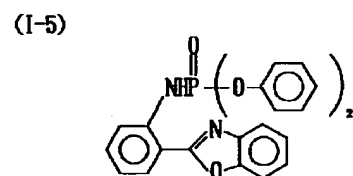
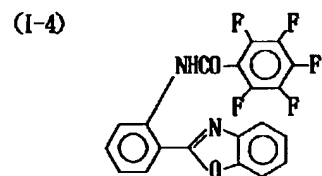
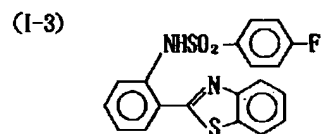
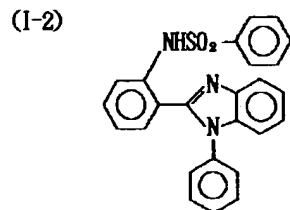
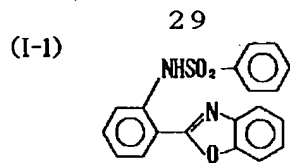
【0080】以下に本発明の一般式（I）で表される部分構造を有する化合物の具体例を示すが、本発明はこれらに限定されるものではない。

【0081】

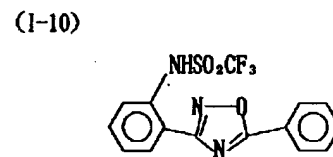
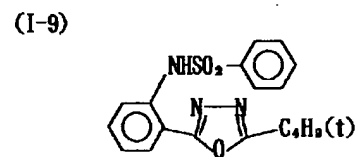
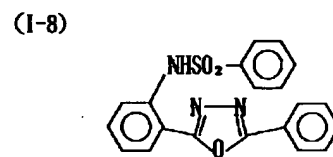
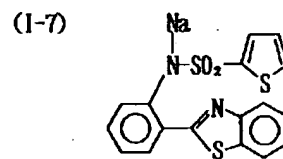
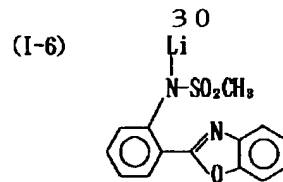
【化27】

(16)

特開2000-355687



【0082】
【化28】



10

20

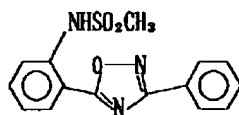
【0083】
30 【化29】

(17)

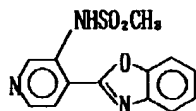
特開2000-355687

31

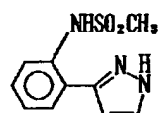
(I-11)



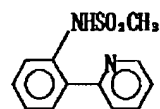
(I-12)



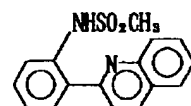
(I-13)



(I-14)



(I-15)



【0084】

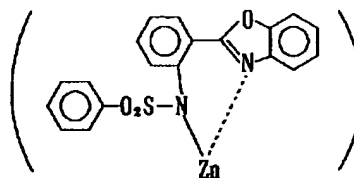
【化30】

10

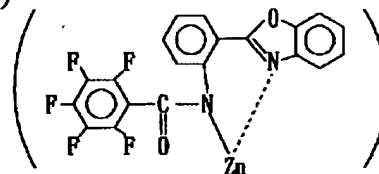
20

30

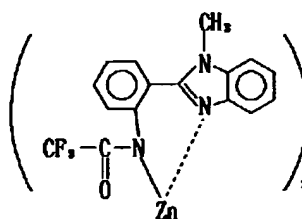
(I-16)



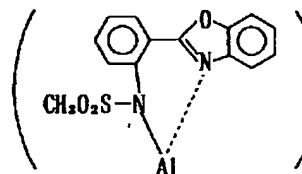
(I-17)



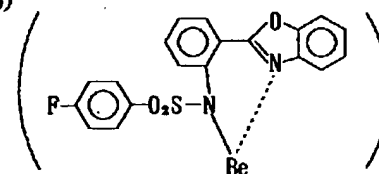
(I-18)



(I-19)

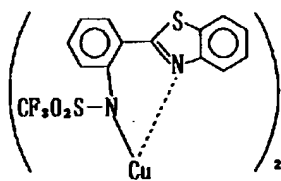


(I-20)

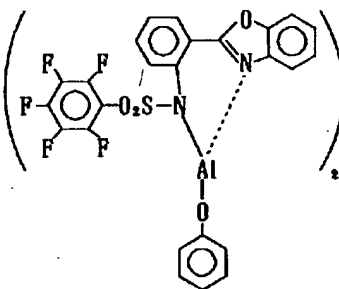


【0085】

【化31】

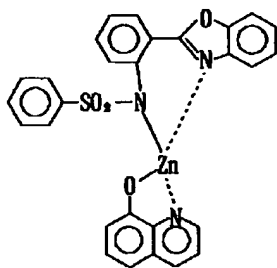
33
(I-21)

(I-22)

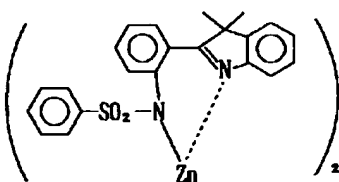


34

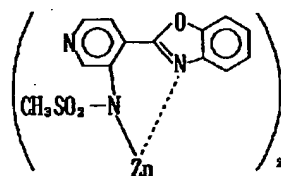
(I-23)



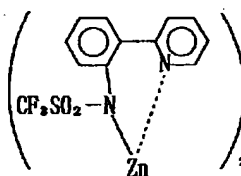
(I-24)



(I-25)

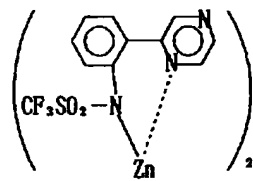


(I-26)

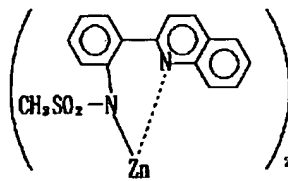


【0086】

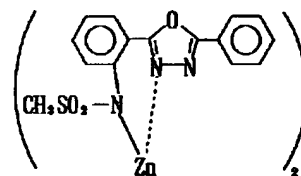
* 30 * 【化32】

35
(I-27)

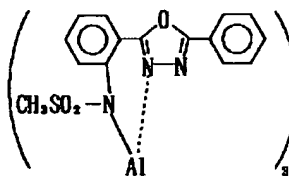
(I-28)



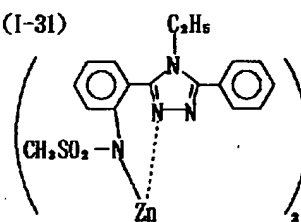
(I-29)



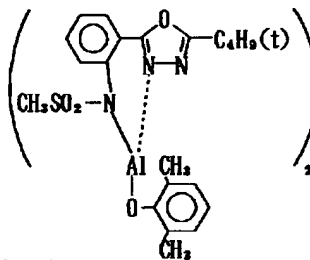
(I-30)



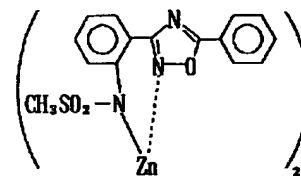
(I-31)



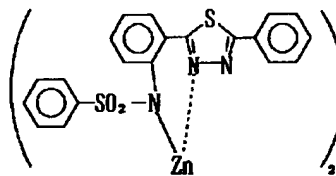
(I-32)



(I-33)



(I-34)

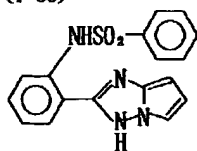


【0087】

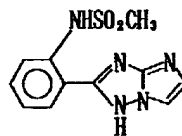
* * 【化33】

37

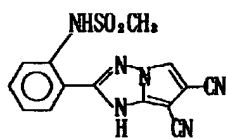
(I-35)



(I-36)



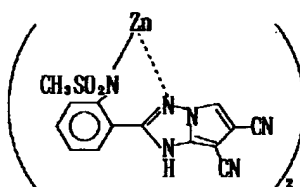
(I-37)



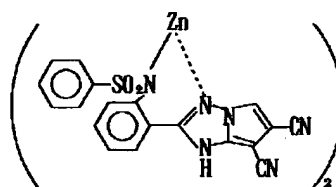
(I-38)



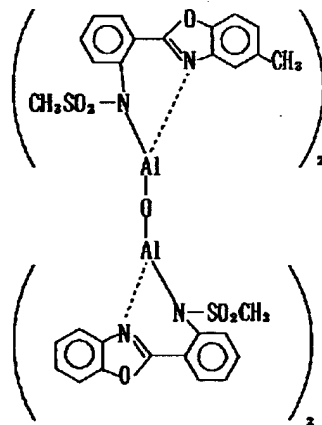
(I-39)

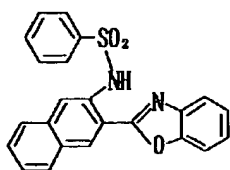


(I-40)

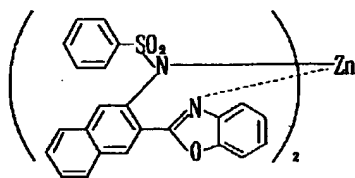


(I-41)

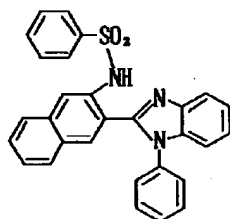


39
(I-42)

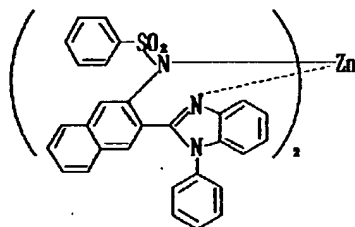
(I-43)



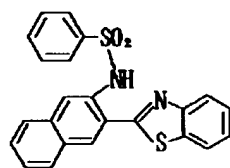
(I-44)



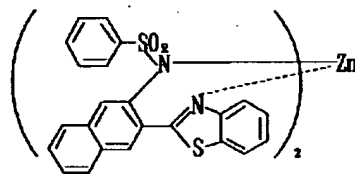
(I-45)



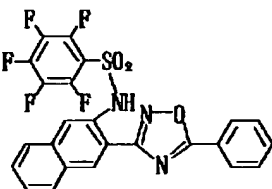
(I-46)



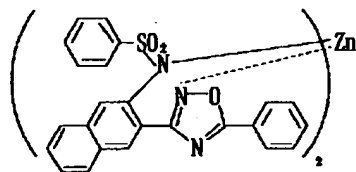
(I-47)



(I-48)



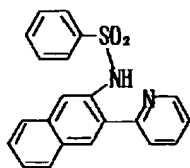
(I-49)



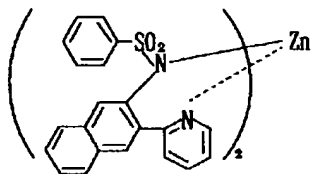
【0089】

* * 【化35】

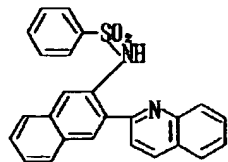
(I-50)



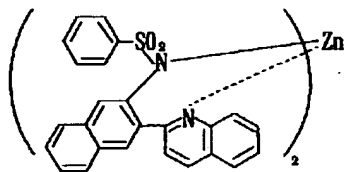
(I-51)



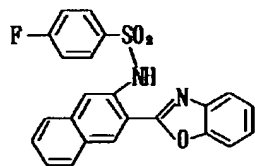
(I-52)



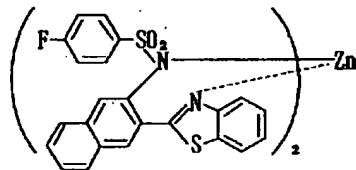
(I-53)



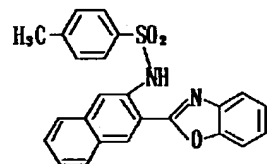
(I-54)



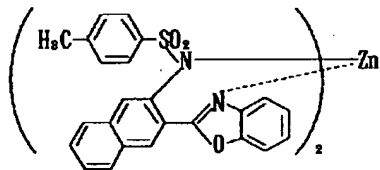
(I-55)



(I-56)

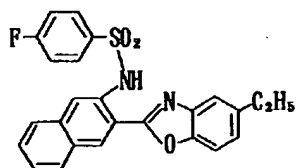


(I-57)

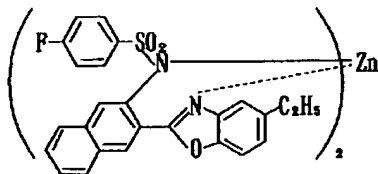


【0090】

* * 【化36】

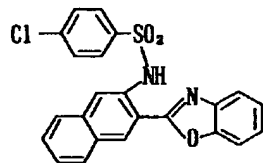
43
(I-58)

(I-59)

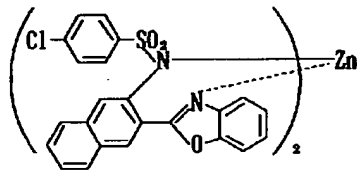


44

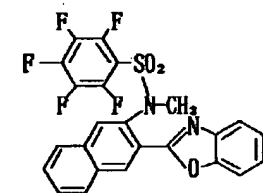
(I-60)



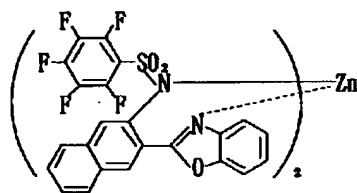
(I-61)



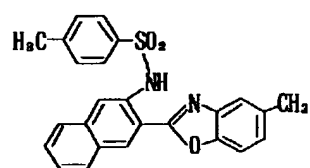
(I-62)



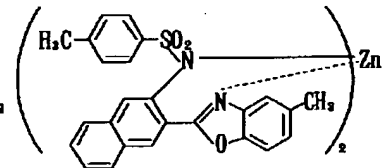
(I-63)



(I-64)



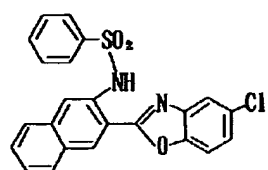
(I-65)



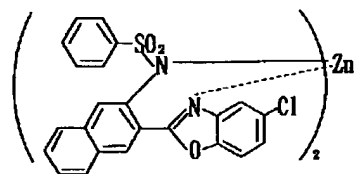
【0091】

* * 【化37】

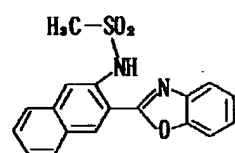
(I-66)



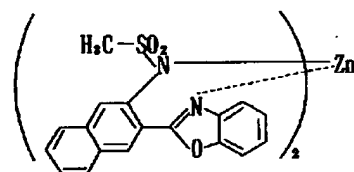
(I-67)



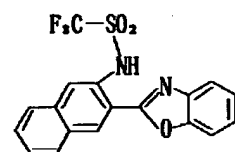
(I-68)



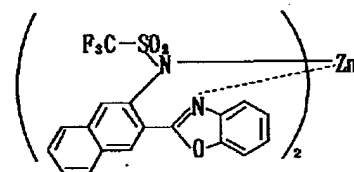
(I-69)



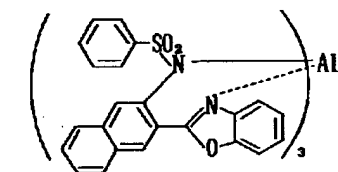
(I-70)



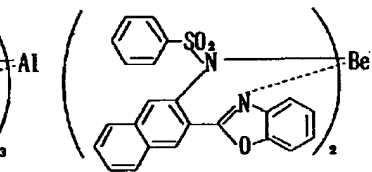
(I-71)



(I-72)

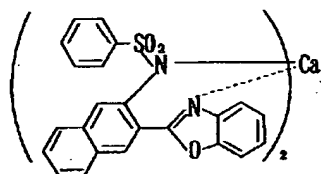


(I-73)

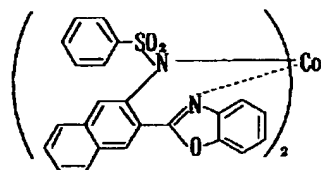


【0092】

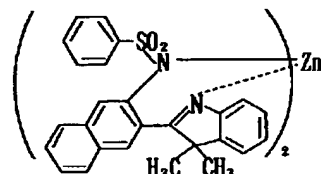
* * 【化38】

47
(I-74)

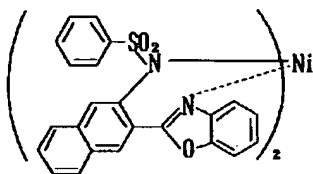
(I-76)



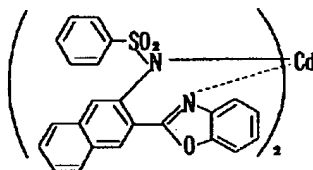
(I-78)



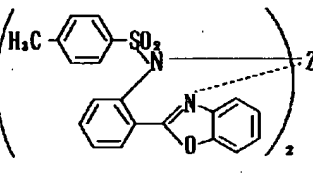
(I-75)



(I-77)



(I-79)



【0093】一般式(I)で表される部分構造を有する化合物またはその互変異性体を配位子に有する金属錯体の合成は、配位子を合成すると同時に錯体化しても、また一旦単離した配位子を用いて金属または金属塩との反応により合成することもできる。本発明の金属錯体の合成に際して原料に用いる金属塩としては、特に限定はないが硝酸塩、ハロゲン塩(フッ化物、塩化物、臭化物、ヨウ化物など)、硫酸塩、カルボン酸塩(酢酸塩など)、ホスホン酸塩、スルホン酸塩、水酸化物などが好適に用いられ、好ましくは硝酸塩、塩酸塩、硫酸塩、酢酸塩である。金属錯体を合成する際に用いる配位子と金属塩のモル比は合成する錯体に応じて適宜選択するが、通常金属イオンに対して配位子を0.1~10倍モル、好ましくは0.5~8倍モル、更に好ましくは0.5~6倍モルである。また、錯体の合成に際しては塩基を用いることができる。塩基としては、種々の無機または有機塩基を用いることができ、例えば金属水酸化物(例えば水酸化ナトリウム、水酸化カリウムなど)、金属炭酸塩(例えば炭酸ナトリウム、炭酸カリウムなど)、金属炭酸水素塩(例えば炭酸水素ナトリウム、炭酸水素カリウムなど)、有機塩基(例えばトリエチルアミン、ナトリウムアルコキシドなど)の使用が好ましい。使用する塩基の量は、特に限定しないが、好ましくは配位子に対して0.01当量~30当量、より好ましくは1当量~10当量である。金属錯体の合成に際しては溶媒を用い*

てもよく、溶媒としては特に限定はないが水、アルコール類(例えばメタノール、エタノール、2-プロパノールなど)、エステル類(例えば酢酸エチルなど)、エーテル類(例えばジエチルエーテル、テトラヒドロフラン、1,4-ジオキサンなど)、アミド類(例えばジメチルホルムアミド、ジメチルアセトアミドなど)、ニトリル類(例えばアセトニトリルなど)、ケトン類(例えばアセトン、シクロヘキサノンなど)、炭化水素類(例えばヘキサン、ベンゼン、トルエンなど)、ハロゲン化炭化水素類(例えばジクロロメタン、クロロホルム、1,2-ジクロロエタンなど)、カルボン酸類(例えば酢酸など)などを用いることができる。また、これら溶媒を混合して用いてもよい。溶媒として好ましくはアルコール類、エーテル類、ケトン類であり、より好ましくはアルコール類であり、特に好ましくはメタノール、エタノール、2-プロパノールである。金属錯体を合成する際の反応温度は特に限定はないが、好ましくは10~150℃、好ましくは10~100℃、より好ましくは10~80℃である。

【0094】次に、本発明の化合物を含有する発光素子に関して説明する。本発明の発光素子は、本発明の化合物を利用する素子であればシステム、駆動方法、利用形態など特に問わないが、本発明の化合物からの発光を利用するもの、または本化合物を電荷輸送材料として利用するものが好ましい。代表的な発光素子として有機EL

(エレクトロルミネッセンス)素子を挙げることができる。

【0095】本発明の化合物を含有する発光素子の有機層の形成方法は、特に限定されるものではないが、抵抗加熱蒸着法、電子ビーム法、スパッタリング法、分子積層法、コーティング法、インクジェット法、印刷法などの方法が用いられ、製造面で抵抗加熱蒸着法、コーティング法が好ましく、抵抗加熱蒸着法がより好ましい。

【0096】本発明の発光素子は陽極、陰極の一対の電極間に発光層もしくは発光層を含む複数の有機化合物薄膜を形成した素子であり、発光層のほか正孔注入層、正孔輸送層、電子注入層、電子輸送層、保護層などを有してもよく、またこれらの各層はそれぞれ他の機能を備えたものであってもよい。各層の形成にはそれぞれ種々の材料を用いることができる。

【0097】陽極は正孔注入層、正孔輸送層、発光層などに正孔を供給するものであり、金属、合金、金属酸化物、電気伝導性化合物、またはこれらの混合物などを用いることができ、好ましくは仕事関数が4 eV以上の材料である。具体例としては酸化スズ、酸化亜鉛、酸化インジウム、酸化インジウムスズ (ITO) 等の導電性金属酸化物、あるいは金、銀、クロム、ニッケル等の金属、さらにこれらの金属と導電性金属酸化物との混合物または積層物、ヨウ化銅、硫化銅などの無機導電性物質、ポリアニリン、ポリチオフェン、ポリピロールなどの有機導電性材料、およびこれらとITOとの積層物などが挙げられ、好ましくは、導電性金属酸化物であり、特に、生産性、高導電性、透明性等の点からITOが好ましい。陽極の膜厚は材料により適宜選択可能であるが、通常10 nm～5 μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは50 nm～1 μmであり、更に好ましくは100 nm～500 nmである。

【0098】陽極は通常、ソーダライムガラス、無アルカリガラス、透明樹脂基板などの上に層形成したものが用いられる。ガラスを用いる場合、その材質については、ガラスからの溶出イオンを少なくするため、無アルカリガラスを用いることが好ましい。また、ソーダライムガラスを用いる場合、シリカなどのバリアコートを施したものを使用することが好ましい。基板の厚みは、機械的強度を保つのに十分であれば特に制限はないが、ガラスを用いる場合には、通常0.2 mm以上、好ましくは0.7 mm以上のものを用いる。陽極の作製には材料によって種々の方法が用いられるが、例えばITOの場合、電子ビーム法、スパッタリング法、抵抗加熱蒸着法、化学反応法 (ゾルゲル法など)、酸化インジウムスズの分散物の塗布などの方法で膜形成される。陽極は洗浄その他の処理により、素子の駆動電圧を下げたり、発光効率を高めることも可能である。例えばITOの場合、UV-オゾン処理、プラズマ処理などが効果的である。

【0099】陰極は電子注入層、電子輸送層、発光層などに電子を供給するものであり、電子注入層、電子輸送層、発光層などの負極と隣接する層との密着性やイオン化ポテンシャル、安定性等を考慮して選ばれる。陰極の材料としては金属、合金、金属ハロゲン化物、金属酸化物、電気伝導性化合物、またはこれらの混合物を用いることができ、具体例としてはアルカリ金属 (例えばLi、Na、K、Cs等) 及びそのフッ化物、アルカリ土類金属 (例えばMg、Ca等) 及びそのフッ化物、金、銀、鉛、アルミニウム、ナトリウム-カリウム合金またはそれらの混合金属、リチウム-アルミニウム合金またはそれらの混合金属、マグネシウム-銀合金またはそれらの混合金属、インジウム、イッテルビウム等の希土類金属等が挙げられ、好ましくは仕事関数が4 eV以下の材料であり、より好ましくはアルミニウム、リチウム-アルミニウム合金またはそれらの混合金属、マグネシウム-銀合金またはそれらの混合金属等である。陰極は、上記化合物及び混合物の単層構造だけでなく、上記化合物及び混合物を含む積層構造を取ることもできる。陰極の膜厚は材料により適宜選択可能であるが、通常10 nm～5 μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは50 nm～1 μmであり、更に好ましくは100 nm～1 μmである。陰極の作製には電子ビーム法、スパッタリング法、抵抗加熱蒸着法、コーティング法などの方法が用いられ、金属を単体で蒸着することも、二成分以上を同時に蒸着することもできる。さらに、複数の金属を同時に蒸着して合金電極を形成することも可能であり、またあらかじめ調整した合金を蒸着させてもよい。陽極及び陰極のシート抵抗は低い方が好ましく、数百Ω/□以下が好ましい。

【0100】発光層の材料は、電界印加時に陽極または正孔注入層、正孔輸送層から正孔を注入することができると共に陰極または電子注入層、電子輸送層から電子を注入することができる機能や、注入された電荷を移動させる機能、正孔と電子の再結合の場を提供して発光させる機能を有する層を形成することができるものであれば何でもよい。好ましくは発光層に本発明の化合物を含有するものであるが、他の発光材料を用いることもできる。例えばベンゾオキサゾール誘導体、ベンゾイミダゾール誘導体、ベンゾチアゾール誘導体、スチリルベンゼン誘導体、ポリフェニル誘導体、ジフェニルブタジエン誘導体、テトラフェニルブタジエン誘導体、ナフタルイミド誘導体、クマリン誘導体、ベリレン誘導体、ベリノン誘導体、オキサジアゾール誘導体、アルダジン誘導体、ピラリジン誘導体、シクロペンタジエン誘導体、ビススチリルアントラセン誘導体、キナクリドン誘導体、ピロロピリジン誘導体、チアジアゾロピリジン誘導体、シクロペンタジエン誘導体、スチリルアミン誘導体、芳香族ジメチリデン化合物、8-キノリノール誘導体の金属錯体や希土類錯体に代表される各種金属錯体等、ポ

リチオフェン、ポリフェニレン、ポリフェニレンビニレン等のポリマー化合物、有機シラン誘導体等が挙げられる。発光層の膜厚は特に限定されるものではないが、通常1nm〜5μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは5nm〜1μmであり、更に好ましくは10nm〜500nmである。発光層の形成方法は、特に限定されるものではないが、抵抗加熱蒸着法、電子ビーム法、スパッタリング法、分子積層法、コーティング法（スピンコート法、キャスト法、ディップコート法など）、LB法、インクジェット法、印刷法などの方法が用いられ、好ましくは抵抗加熱蒸着法、コーティング法である。

【0101】正孔注入層、正孔輸送層の材料は、陽極から正孔を注入する機能、正孔を輸送する機能、陰極から注入された電子を障壁する機能のいずれか有しているものであればよい。その具体例としては、カルバゾール誘導体、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、イミダゾール誘導体、ポリアリーラルカン誘導体、ピラゾリン誘導体、ピラゾロン誘導体、フェニレンジアミン誘導体、アリーラルアミン誘導体、アミノ置換カルコン誘導体、スチリルアントラセン誘導体、フルオレノン誘導体、ヒドラゾン誘導体、スチルベン誘導体、シラザン誘導体、芳香族第三級アミン化合物、スチリルアミン化合物、芳香族ジメチリデン系化合物、ボルフィリン系化合物、ポリシラン系化合物、ポリ（N-ビニルカルバゾール）誘導体、アニリン系共重合体、チオフェンオリゴマー、ポリチオフェン等の導電性高分子オリゴマー、有機シラン誘導体等が挙げられる。正孔注入層、正孔輸送層の膜厚は特に限定されるものではないが、通常1nm〜5μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは5nm〜1μmであり、更に好ましくは10nm〜500nmである。正孔注入層、正孔輸送層は上述した材料の1種または2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成または異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。正孔注入層、正孔輸送層の形成方法としては、真空蒸着法、LB法、インクジェット法、印刷法、前記正孔注入輸送剤を溶媒に溶解または分散させてコーティングする方法（スピンコート法、キャスト法、ディップコート法など）が用いられる。コーティング法の場合、樹脂成分と共に溶解または分散することができ、樹脂成分としては例えば、ポリ塩化ビニル、ポリカーボネート、ポリスチレン、ポリメチルメタクリレート、ポリブチルメタクリレート、ポリエステル、ポリスルホン、ポリフェニレンオキシド、ポリブタジエン、ポリ（N-ビニルカルバゾール）、炭化水素樹脂、ケトン樹脂、フェノキシ樹脂、ポリアミド、エチルセルロース、酢酸ビニル、ABS樹脂、ポリウレタン、メラミン樹脂、不飽和ポリエステル樹脂、アルキド樹脂、エポキシ樹脂、シリコン樹脂などが挙げられる。

【0102】電子注入層、電子輸送層の材料は、陰極か

ら電子を注入する機能、電子を輸送する機能、陽極から注入された正孔を障壁する機能のいずれか有しているものであればよい。その具体例としては、トリアゾール誘導体、オキサゾール誘導体、オキサジアゾール誘導体、フルオレノン誘導体、アントラキノジメタン誘導体、アントロン誘導体、ジフェニルキノン誘導体、チオピランジオキシド誘導体、カルボジイミド誘導体、フルオレニリデンメタン誘導体、ジスチリルピラジン誘導体、ナフタレン、ペリレン等の複素環テトラカルボン酸無水物、フタロシアニン誘導体、8-キノリノール誘導体の金属錯体やメタルフタロシアニン、ベンゾオキサゾールやベンゾチアゾールを配位子とする金属錯体に代表される各種金属錯体、有機シラン誘導体、本発明の化合物等が挙げられる。電子注入層、電子輸送層の膜厚は特に限定されるものではないが、通常1nm〜5μmの範囲のものが好ましく、より好ましくは5nm〜1μmであり、更に好ましくは10nm〜500nmである。電子注入層、電子輸送層は上述した材料の1種または2種以上からなる単層構造であってもよいし、同一組成または異種組成の複数層からなる多層構造であってもよい。電子注入層、電子輸送層の形成方法としては、真空蒸着法、LB法、インクジェット法、印刷法、前記電子注入輸送剤を溶媒に溶解または分散させてコーティングする方法（スピンコート法、キャスト法、ディップコート法など）などが用いられる。コーティング法の場合、樹脂成分と共に溶解または分散することができ、樹脂成分としては例えば、正孔注入輸送層の場合に例示したものが適用できる。

【0103】保護層の材料としては水分や酸素等の素子劣化を促進するものが素子内に入ることを抑止する機能を有しているものであればよい。その具体例としては、In、Sn、Pb、Au、Cu、Ag、Al、Ti、Ni等の金属、MgO、SiO、SiO₂、Al₂O₃、GeO、NiO、CaO、BaO、Fe₂O₃、Y₂O₃、TiO₂等の金属酸化物、MgF₂、LiF、AlF₃、CaF₂等の金属フッ化物、ポリエチレン、ポリプロピレン、ポリメチルメタクリレート、ポリイミド、ポリウレタ、ポリテトラフルオロエチレン、ポリクロロトリフルオロエチレン、ポリジクロロジフルオロエチレン、クロロトリフルオロエチレンとジクロロジフルオロエチレンとの共重合体、テトラフルオロエチレンと少なくとも1種のモノマーとを含むモノマー混合物を共重合させて得られる共重合体、共重合主鎖に環状構造を有する含フッ素共重合体、吸水率1%以上の吸水性物質、吸水率0.1%以下の防湿性物質等が挙げられる。保護層の形成方法についても特に限定はなく、例えば真空蒸着法、スパッタリング法、反応性スパッタリング法、MBE（分子線エピタキシー）法、クラスターイオンビーム法、イオンプレーティング法、プラズマ重合法（高周波励起イオンプレーティング法）、プラズマCVD法、レ

ーザーCVD法、熱CVD法、ガスソースCVD法、コーティング法、インクジェット法、印刷法を適用できる。

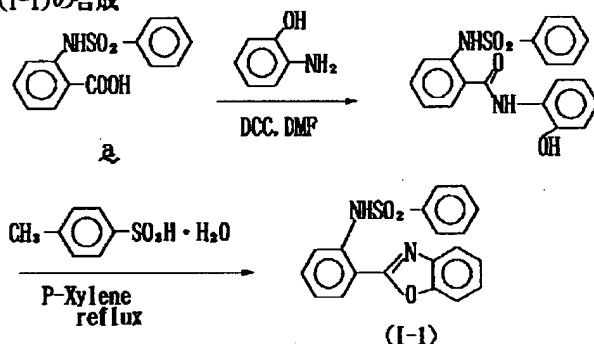
【0104】

【実施例】以下に本発明の具体的実施例を述べるが、本発明の実施の態様はこれらに限定されない。

(I-1)の合成

化合物a 5g、o-アミノフェノール2.4gをジメチルホルムアミド50mlに溶解し、これに、ジシクロヘキシルカルボジイミド(DCC)を5.6g添加した。10 室温で3時間攪拌した後、酢酸エチル200ml、一規定塩酸水200mlで希釈し、分離した有機層を一規定塩酸水200ml、水200ml、飽和食塩水100ml

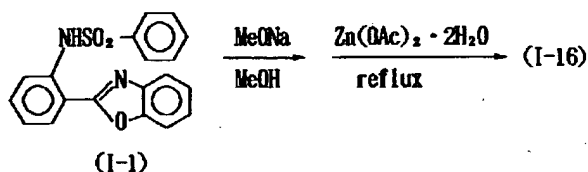
(I-1)の合成



【0106】(I-16)の合成

(I-1) 0.4gにメタノール10mlを加え、MeONaのメタノール溶液(28wt%) 0.22mlを滴下した。滴下終了後、反応液は均一系になった。室温で5分間攪拌後、酢酸亜鉛2水和物0.13gを添加し、加熱還流下1時間攪拌した。析出した固体をろ別 ※30

(I-16)の合成



【0108】(I-42)の合成

3-アミノ-2-ナフトン酸15.0g(80mmol)、ベンゼンスルホニルクロライド14.1g(80mmol)、アセトニトリル100mLを激しく攪拌し、40 ピリジン6.3gを室温で滴下した後、反応溶液を2時間加熱還流する。反応溶液を室温まで冷却した後、クロロホルム、メタノール、1N塩酸水溶液で抽出操作を行い、有機相を回収し、硫酸ナトリウムで乾燥、ろ過後、溶媒を減圧留去し、白色の固体を得た。得られた固体にクロロホルム200mLを加え、ピリジン9.7mL(120mmol)、2-アミノフェノール10.4g(96mmol)、ジシクロヘキシルカルボジイミド(DCC)24.7g(120mmol)を加え、3時間加熱★50

*1でそれぞれ洗浄した。硫酸ナトリウムで乾燥、ろ過後濃縮した後、カラムクロマトグラフィー(展開溶媒クロロホルム)により精製し、淡黄色固体3.5gを得た。この化合物3.5gにp-キシレン50mlを加え、p-tertブチルエンスルホン酸一水和物0.1gを添加した。溶液を2時間加熱還流し、同時にディーンスターク装置により留出する水を除去した。溶液にメタノールを加え、析出した結晶をろ別した。再結晶(クロロホルム/メタノール)により精製し、白色固体(I-1)1.4gを得た。質量分析により、(I-1)の構造を確認した。

【0105】

【化39】

※し、青色蛍光を有する白色固体(I-16)0.35gを得た。

融点: 300℃以上

【0107】

【化40】

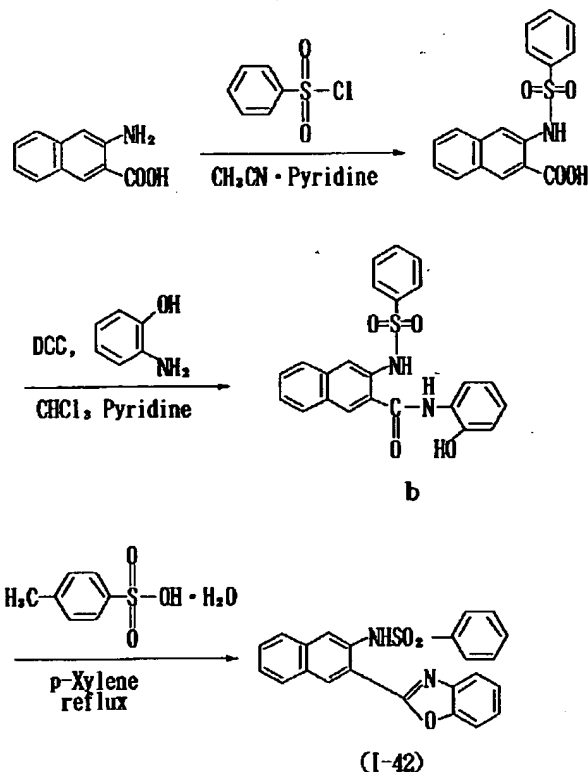
★還流した。反応溶液を室温まで冷却した後、クロロホルム、飽和食塩水で抽出操作を行い、有機相を回収し、硫酸ナトリウムで乾燥、ろ過後、溶媒を減圧留去し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキサン-酢酸エチル、9/1~5/5、w/w)により精製操作を行い化合物bを10.0g(収率30%)得た。

【0109】化合物b 10.0g(23.8mmol)にキシレン150mLを加え、触媒としてp-tertブチルエンスルホン酸一水和物230mgを添加し、8時間加熱還流した後、反応溶液を室温まで冷却し、クロロホルム、飽和炭酸水素ナトリウム水溶液で抽出操作を行い、有機相を回収し、硫酸ナトリウムで乾燥、ろ過後、溶媒を減圧留去し、シリカゲルカラムクロマトグラフィー(ヘキ

サンークロロホルム)により精製操作を行い化合物(I-42)を1.1g(収率12%)得た。質量分析により構造を確認した。

*【0110】
【化41】

*



【0111】(I-43)の合成

化合物(I-42)250mg(0.62mmol)にエタノール100mL、クロロホルム10mLを加え、加熱還流した後、酢酸亜鉛二水和物68.4mg(0.31mmol)をエタノール5mLに溶解させたものをゆっくりと滴下した。滴下後反応液を10時間加熱還流し、反応液が熱いうちに熱時処理を行い、黄色の結晶として化合物(I-43)を120mg(22%)得た。元素分析により得られた結晶の組成を確かめた。

元素分析

calcd. C 63.93% H 3.50% N 6.48%

Found C 63.76% H 3.58% N 6.42%

融点: 300℃以上

比較例1

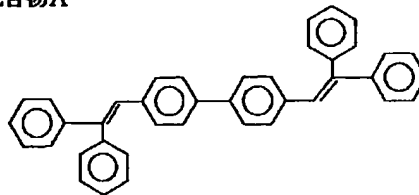
洗浄したITO基板を蒸着装置内に入れ、基板上にTPD(N,N'-ジフェニル-N,N'-ジ(m-トリル)ベンジジン)を40nm蒸着し、この上に化合物Aを20nm蒸着し、さらにこの上にAlq(トリス(8-ヒドロキシキノリナト)アルミニウム錯体)40nmを蒸着した。有機薄膜上にパターンニングしたマスク(発光面積が5mm×5mmとなるマスク)を設置し、蒸着装置内でマグネシウム:銀=10:1を50nm共蒸着※50

※した後、銀50nmを蒸着してEL素子を作製した。東陽テクニカ製ソースメジャーユニット2400型を用いて、直流定電圧をEL素子に印加し発光させ、その輝度をトプコン社の輝度計BM-8、発光波長を浜松フォトニクス社製スペクトルアナライザーPMA-11を用いて測定した。その結果、色度値(0.19, 0.30)の青緑色発光が得られ、13Vで2400cd/m²の輝度が得られた。

【0112】

【化42】

化合物A



40

【0113】実施例1

Alqの代わりに、本発明の化合物(I-16)を用い、比較例1と同様に素子を作製して評価した。その結果、色度値(0.16, 0.16)の色純度の高い青色発光が得られ、13Vで2500cd/m²の輝度が得られた。

【0114】実施例2

洗浄したITO基板を蒸着装置内に入れ、基板上に α -NPD (N, N'-ジフェニル-N, N'-ジ(α -ナフチル)ベンジジン)を40nm蒸着し、この上に化合物(I-29)を60nm蒸着し、比較例1と同様に陰極を蒸着してEL素子を作製した。比較例1と同様に素子の評価をした。その結果、色度値(0.16, 0.17)の青色発光が得られ、15Vで1200cd/m²の輝度が得られた。

【0115】実施例3

ポリ(N-ビニルカルバゾール)40mg、(I-22)6mgを1,2-ジクロロエタン3mlに溶解し、洗浄したITO基板上にスピコートした。生成した有機薄膜の膜厚は、約100nmであった。比較例1と同様に陰極を蒸着してEL素子を作製した。比較例1と同様に素子の評価をし、その結果、色度値(0.15, 0.17)の青色発光が得られ、20Vで440cd/m²の輝度が得られた。

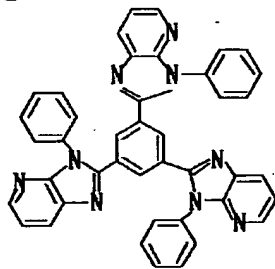
【0116】実施例4

洗浄したITO基盤を蒸着装置内に入れ、基板上に α -NPDを40nm蒸着し、この上に例示化合物I-43を20nm蒸着し、更にこの上に電子輸送材料として化合物Bを40nm積層し、比較例1と同様に陰極を蒸着してEL素子を作製した。その結果、色度座標(0.30, 0.54)の緑色発光が得られ、16Vで1035cd/m²の輝度が得られた。

【0117】

【化43】

化合物B



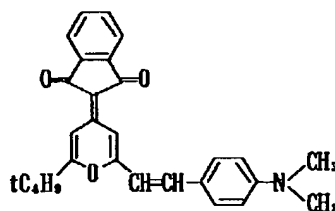
【0118】実施例5

洗浄したITO基盤を蒸着装置内に入れ、基板上に α -NPDを40nm蒸着し、この上に例示化合物I-43、化合物C(赤色発光ドーパ色素)(蒸着レート100:1)を20nm蒸着し、更にこの上に化合物Bを40nm積層し、比較例1と同様に陰極を蒸着してEL素子を作製した。その結果、色度座標(0.66, 0.32)の赤色発光が得られ、15Vで823cd/m²の輝度が得られ、ホスト材料としても機能することが分かった。

【0119】

【化44】

化合物C



【0120】同様に、本発明の他の化合物を含有するEL素子を作製・評価したところ、本発明の化合物がEL素子材料(電荷輸送材料・発光材料・ホスト材料)として機能することが確認できた。特に、色純度の高い青色あるいは緑色の発光素子を作製できることが分かった。

【0121】

【発明の効果】本発明の化合物は有機EL用材料として使用可能であり、本発明の化合物を含有する素子は色相・輝度などのEL特性に優れる。また、本発明の化合物は医療用途、蛍光増白剤、写真用材料、UV吸収材料、レーザー色素、カラーフィルター用染料、色変換フィルター等にも適用可能である。

フロントページの続き

(51)Int. Cl.⁷

識別記号

F I

テマコード(参考)

C 07 D 231/12
235/18
241/12
249/08
263/56
271/06
271/10
277/66
285/125

513

C 07 D 231/12
235/18
241/12
249/08
263/56
271/06
271/10
277/66
487/04

513

139

(31)

特開2000-355687

487/04
C07F 3/06

139

C07F 3/06
C07D 285/12

D